

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ
ЮЖНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
АСТРАХАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

О.П. Исакова, Ю.Ю. Тарасевич, Ю.И. Юзюк

**Обработка и визуализация данных
физических экспериментов с помощью
пакета Origin.**

Анализ и обработка спектров

Астрахань, Ростов-на-Дону – 2007

ББК 22.3в6
УДК 53.088

Рекомендовано к печати

Рецензенты:

Исакова О.П., Тарасевич Ю.Ю., Юзюк Ю.И. Обработка и визуализация данных физических экспериментов с помощью пакета Origin. Анализ и обработка спектров. Учебно-методическое пособие. – Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, 2007.

Учебно-методическое пособие на конкретных примерах учит приемам обработки спектров с помощью пакета Origin. Рассматриваются типичные задачи, наиболее часто встречающиеся на практике.

Учебно-методическое пособие может использоваться при изучении дисциплины ... студентами направлений «Нанотехнология», «Физика» и других физических направлений и специальностей. Пособие будет полезно всем тем, кому по роду своей деятельности приходится иметь дело с анализом спектров.

ISBN XXXXXXXXXXXXXXXX

©Исакова О.П., Тарасевич Ю.Ю., Юзюк Ю.И., 2007
© Издательство

Содержание

Введение.....	4
1. Импортрование данных	6
2. Отображение данных.....	8
3. Смещение графиков.....	25
4. Совмещение графиков.....	29
5. Несколько слоев	32
6. Корректировка спектров	40
7. Простые операции со спектрами.....	43
8. Сглаживание спектров	52
9. Аппроксимация спектров лоренцианами	57
Литература	74

Введение

Теории приходят и уходят,
а примеры остаются.

И.М.Гельфанд

Пакет Origin широко применяется исследователями всего мира для обработки и визуализации экспериментальных данных. Пакет пользуются заслуженной популярностью среди ученых и в нашей стране, существенно облегчая трудоемкий процесс обработки данных и их подготовки для публикаций. К сожалению, на русском языке практически отсутствует литература, которую можно было бы использовать для обучения студентов физических и родственных специальностей основным приемам работы с пакетом Origin. Единственная вышедшая большим тиражом книга на русском языке [2] мало подходит для целей обучения студентов-физиков, т.к. в ней отсутствуют практически значимые примеры, и все изложение ориентировано на начинающего пользователя, слабо ориентирующегося в стандартном меню. Несколько учебных пособий по Origin выпущено малыми тиражами университетскими издательствами [3–5]. Однако они недоступны широкому кругу студентов и ориентированы на узкие и специфические задачи.

Данное учебно-методическое пособие знакомит с методами обработки и визуализации данных физических экспериментов на примере реальных спектроскопических задач. Пособие является продолжением недавно вышедшей работы [1].

Естественно, объем учебно-методического пособия не позволил сколько-нибудь полно осветить все возможности Origin по обработке спектров, но это и не нужно при первоначальном знакомстве с пакетом. Подбор материала должен стимулировать студентов использовать полученные знания на практике.

Настоящее учебно-методическое пособие адресовано в первую очередь студентам-физикам. Однако, мы надеемся, что оно может быть полезно также студентам других естественнонаучных и инженерных специальностей – всем тем, кому по роду своей деятельности приходится иметь дело с анализом и визуализацией экспериментальных данных.

На рынке программных продуктов можно найти множество коммерческих и бесплатно распространяемых программ, позволяющих облегчить трудоемкий процесс обработки данных и их представления в компактном, удобном и наглядном виде. Назовем только некоторые из них: Axum, SigmaPlot, SmartDraw, GNUplot. Каждая из этих программ имеет своих более или менее многочисленных поклонников, которые привыкли к используемой программе, научились решать с ее помощью типовые задачи, встре-

чающиеся в их практике и, естественно, не очень охотно согласятся потратить время и силы для освоения какой-либо иной программы до тех пор, пока не столкнутся с задачей, которая окажется не по зубам привычному пакету. Конечно, специалист должен быть способен решать возникающие задачи с помощью любого доступного программного средства, однако лучше всего это делать с помощью специализированных программных продуктов, обеспечивающих наилучший результат при минимальных затраченных усилиях.

Особенностью данного учебно-методического пособия является то, что оно целиком опирается на реальные задачи. Мы убеждены, что учить нужно на конкретных и осмысленных примерах, которые способны убедить студента в действительной полезности преподносимых ему знаний. Опыт преподавания убеждает нас в том, что при таком подходе, который в методической литературе принято называть контекстным, студенты с первого же занятия получают стимул изучать пакет, активно применяют его при выполнении лабораторных работ и проведении научных исследований, самостоятельно осваивают дополнительные возможности пакета, обращаются с просьбами подсказать, как можно решить ту или иную возникшую у них задачу. Поскольку все студенты знакомы с MS Excel, они быстро убеждаются в том, что Origin – именно тот инструмент, который создан специально для физиков.

Решаемые задачи постепенно усложняются и опираются на уже освоенный материал. Таким образом, изученный материал оказывается востребованным при изучении новых возможностей пакета и постоянно закрепляется на практике.

На протяжении всего текста мы старались последовательно закреплять приобретенные знания: часть работы предлагается выполнять самостоятельно, новая информация вводится очень небольшими порциями и опирается на полученные ранее знания. В пособии приводятся упражнения, которые должны помочь закрепить изученный материал.

Предполагается, что учебно-методическое пособие будет полезно студентам направлений «Физика», «Нанотехнология» и других физических направлений и специальностей.

1. Импорт данных

В данной части пособия при изучении возможностей пакета Origin анализировать и обрабатывать спектры вам придется все время импортировать данные. Мы уже описывали в первой части пособия [1], как производить импорт данных, поэтому в этой части мы лишь напомним основные шаги.

После того, как вы запустите программу Origin Pro 7, и перед вами появится таблица, в меню File (файл) выберите команду Import / Single ASCII (Импорт / Одиночный ASCII) (рис. 1.1).

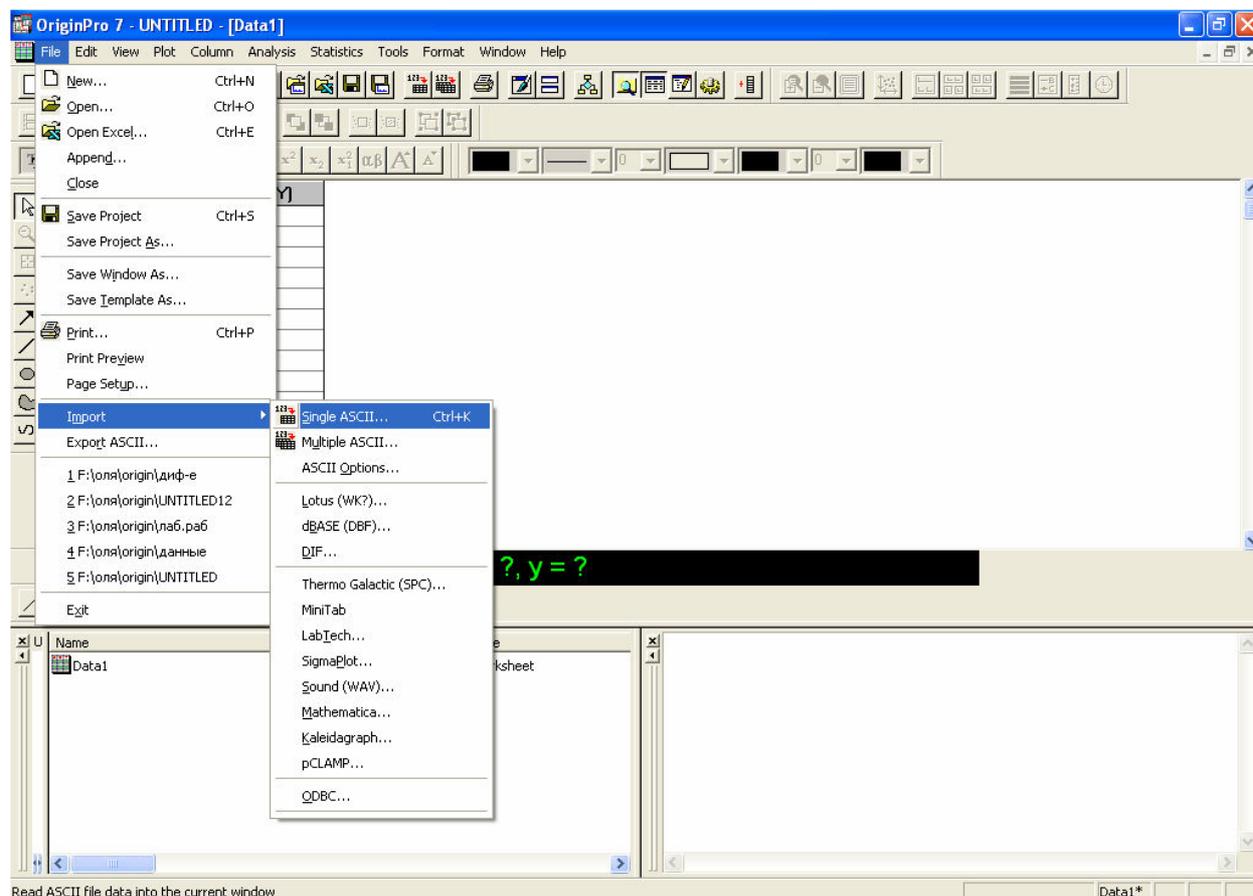


Рис. 1.1. Импорт данных

В появившемся стандартном запросе имени файла выберите нужный и нажмите Открыть (рис. 1.2). После этого у вас отобразится таблица с данными, используя которую, вы и будете выполнять дальнейшие действия.

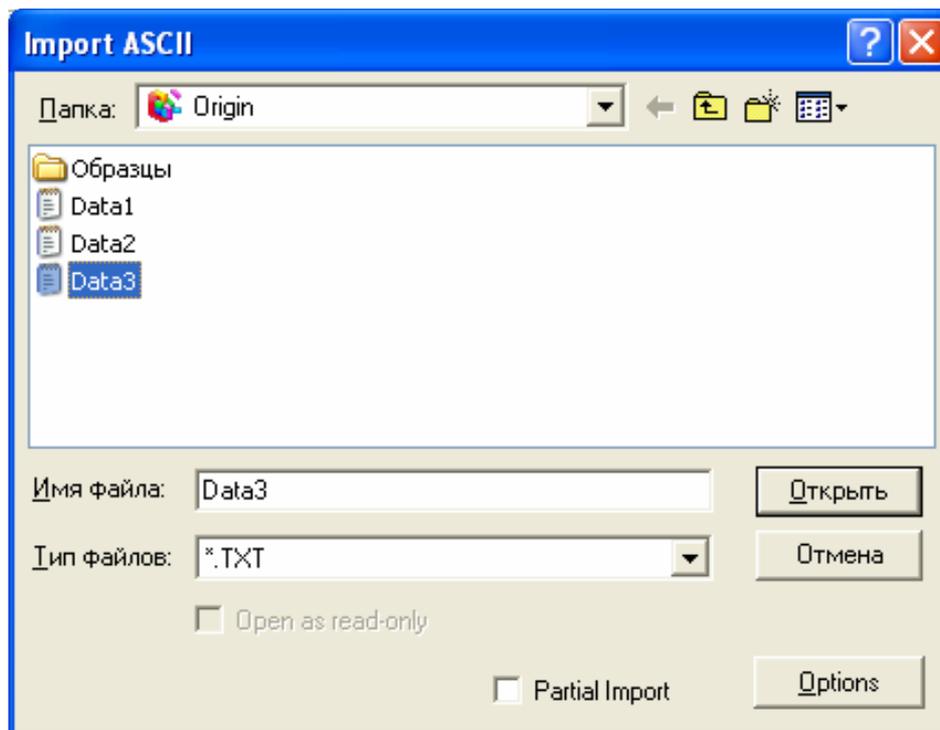


Рис. 1.2. Окно импорта данных

Origin автоматически в качестве имени таблицы присвоит имя файла и использует текст из файла в качестве подписей столбцов.

2. Отображение данных

В файле PTOFIG3n приведены температурные зависимости частоты (ν) и полуширины (Γ) E (1TO) мягкой моды в монокристалле PbTiO₃ и поликристаллической пленки. Импортируйте данные из файла. Необходимо отобразить эти данные на графике. Для этого в таблице выделите колонки A(X) и Film(Y) (см. рис. 2.1). При этом убедитесь, что роль колонки A – X, а роль колонки B – Y. Под таблицей имеется панель инструментов, на которой указаны всевозможные способы отображения экспериментальных данных (рис. 2.1). Выберите кнопку Scatter (Точки) (вторая слева). После нажатия на нее у вас появится окно Graph 1 с отображением зависимости частоты мягкой моды в монокристалле PbTiO₃ от температуры в виде точек (рис. 2.2).

The screenshot shows the OriginPro 7 interface with a data table named 'FreqDAT'. The table has the following data:

	A[X]	Film[Y]	Burns[Y]	Crystal[Y]
1	300	80	89	88
2	350	80	-	-
3	400	78	85	85,5
4	450	77	-	-
5	500	76	81	82,2
6	550	74	-	-
7	580	72	-	-
8	600	70	-	78
9	630	69	75	-
10	670	66	73	75
11	700	62	-	72,7
12	720	57	69	69,9
13	730	55	66	68
14	740	54	-	-
15	745	53	63	64,6
16	748	52	-	60,3
17	750	52	61,5	-
18	753	51	-	57,7

Below the table, a panel of plotting tools is visible. The 'Scatter' button (represented by a green circle) is highlighted, and a green text box below it displays 'x = ?, y ='.

Рис. 2.1. Панель со всевозможными способами отображения данных

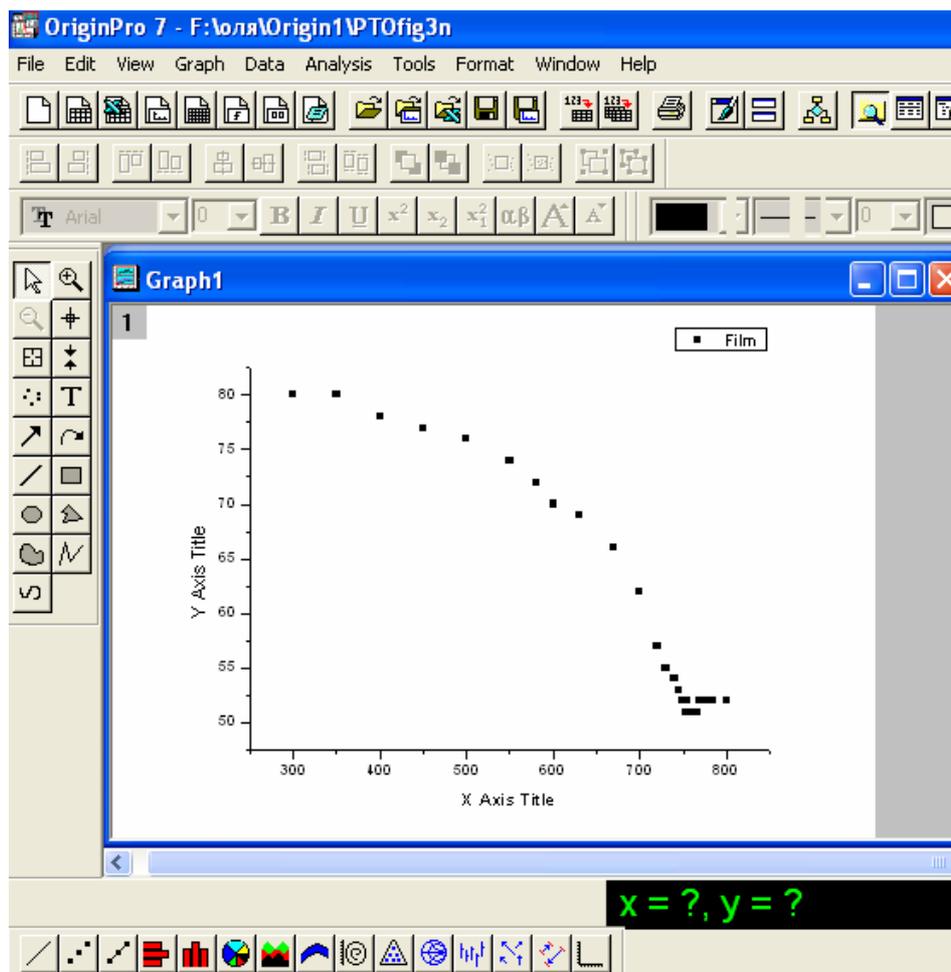


Рис. 2.2. Отображение в виде точек зависимости частоты мягкой моды в монокристалле PbTiO_3 от температуры

На рисунках 2.3 и 2.4 представлены другие варианты отображения данных – с помощью линии (рис. 2.3), и точек, соединенных линией (рис. 2.4).

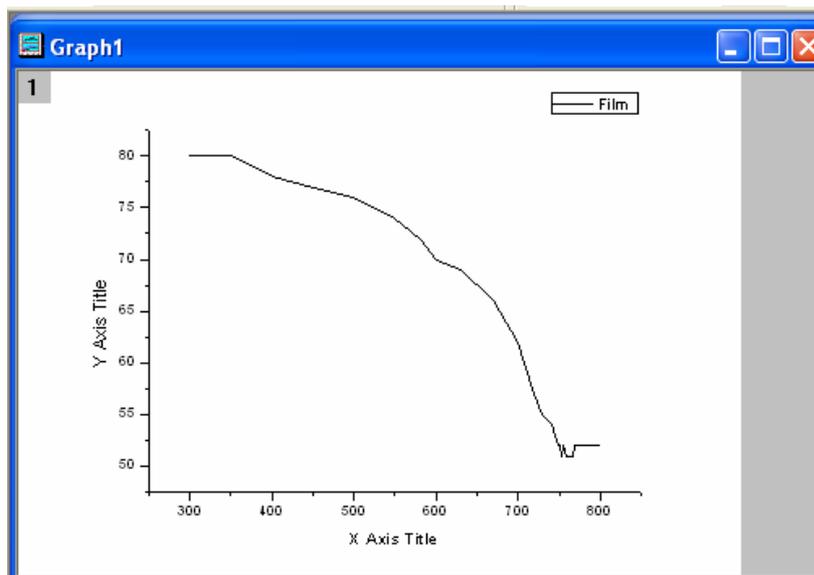


Рис. 2.3. Пример графика типа Line (линия)

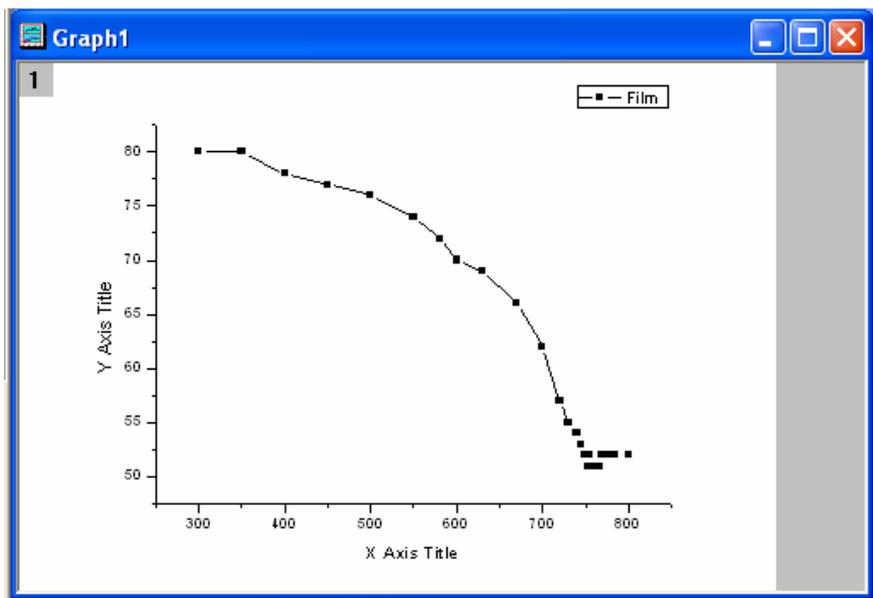


Рис. 2.4. Пример графика типа Line+Symbol (линия+символ)

В таблице на рис. 2.1 приведены данные для поликристаллической пленки [6], а также данные Бёрнса и Скотта [7]. Их тоже необходимо отобразить на этом же графике. На иконке слоя 1 (серый квадратик в левом верхнем углу окна Graph 1) щелкните правой кнопкой мыши, появится подменю, в котором выберите пункт Plot Associations (рис. 2.5).

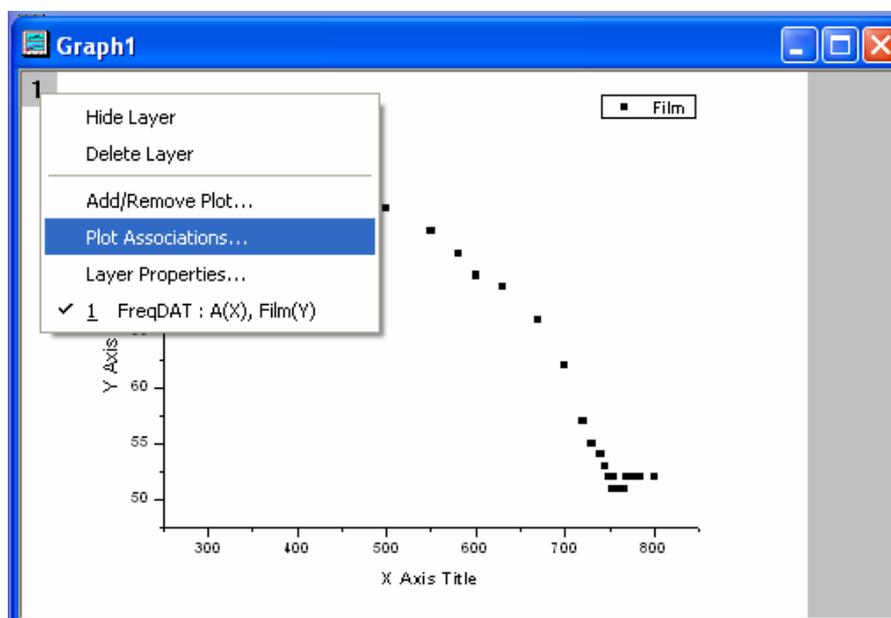


Рис. 2.5. Добавление нового слоя на график

В окне Select Columns for Plotting в списке Worksheet найдите имя вашей таблицы и выберите ее. В списке перечисленных колонок таблицы

выберите колонки А и С (или Burns), задав им роли X и Y соответственно. Добавьте новый набор данных, нажав кнопку **Add** (добавить). То же самое сделайте и для колонок А и D (или Crystal), после чего нажмите **OK** (рис. 2.6). На графике отобразятся новые точки (рис. 2.7).

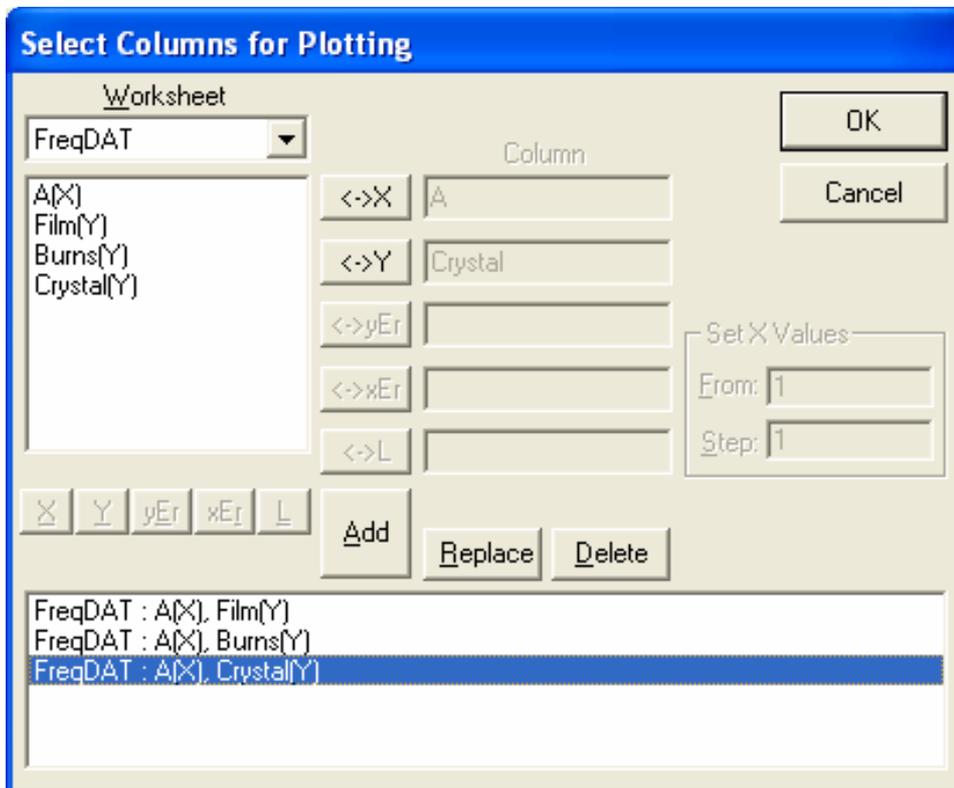


Рис. 2.6. Добавление новых наборов данных

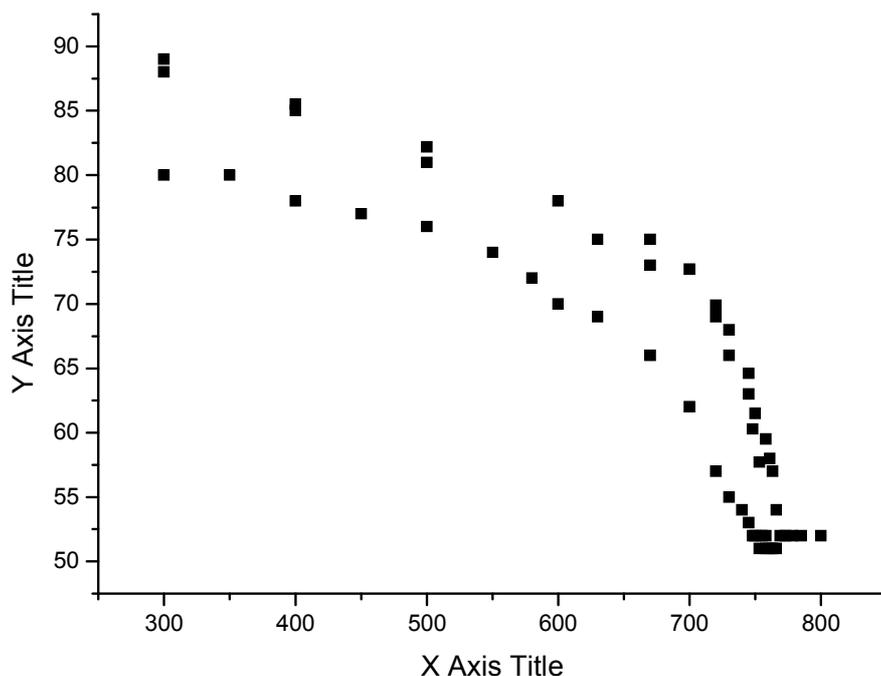


Рис. 2.7. Отображение на графике другого набора данных

Внешний вид символов по желанию можно изменить. После двойного щелчка по одной из точек любого набора данных на графике, появится окно **Plot Details** (Параметры графика), где на закладке **Symbol** (Символ) можно изменить вид символов, нажав кнопку **Preview** (Предварительный просмотр) с черной треугольной стрелкой. Здесь также можно задать размер символов в списке **Size** (Размер), цвет – в списке **Color** (Цвет), толщину линий – в списке **Edge Thickness** (толщина линий) (рис. 2.8).

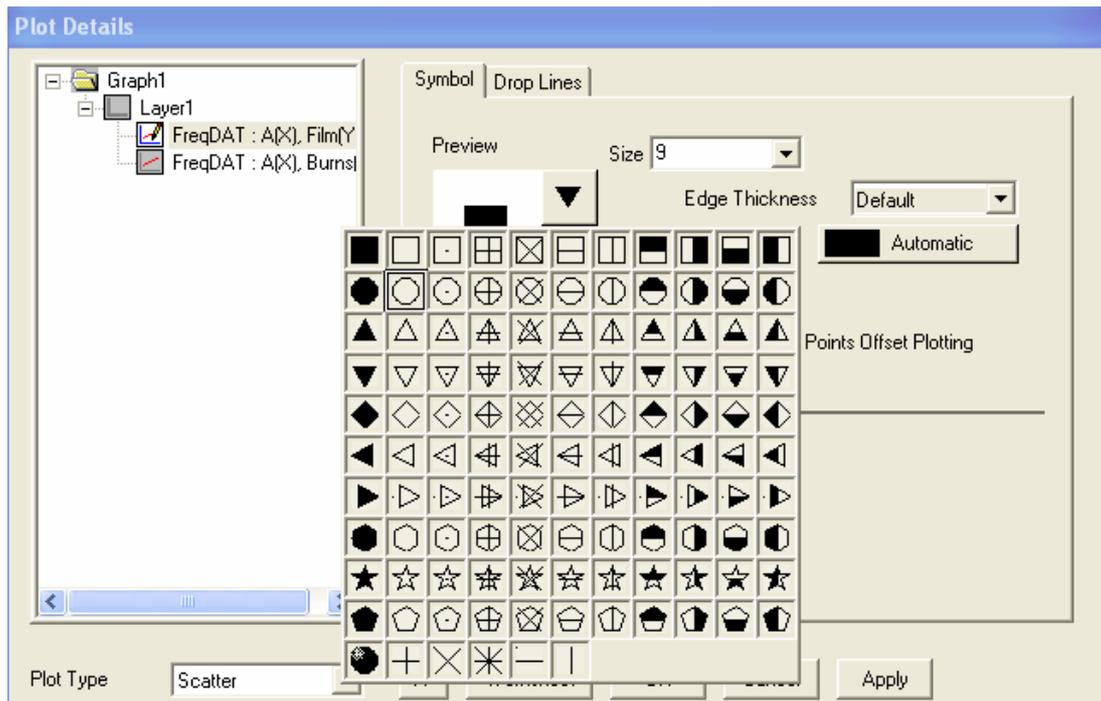


Рис. 2.8. Элементы настройки символов для графика

Можно сопоставить экспериментальные данные, соединив точки графика с осями при помощи линий, которые отобразятся после того, как на закладке **Drop Lines** (Линии соединения) вы установите переключатели **Horizontal** (Горизонтальные) и **Vertical** (Вертикальные) (рис. 2.9). Параметры этих линий тоже можно менять.

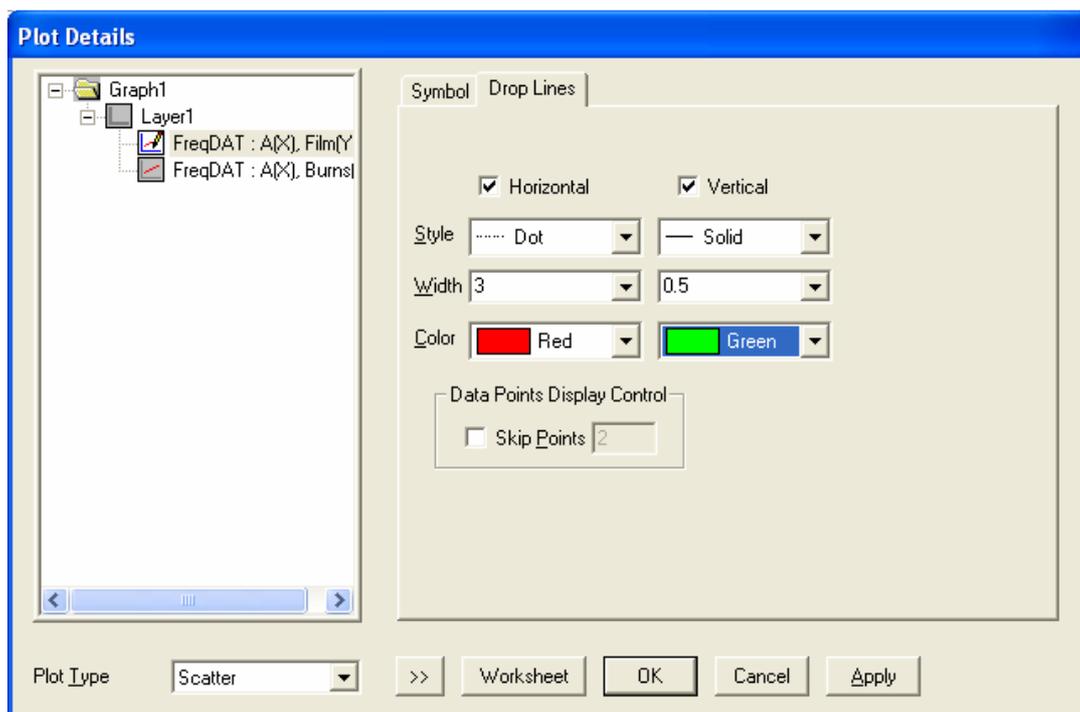


Рис. 2.9. Специфические настройки графика

В оформлении графика завершающим этапом опишем, как изменить подписи к координатным осям. Двойным щелчком по одной из осей вызовите диалоговое окно для определения свойств осей (рис. 2.10).

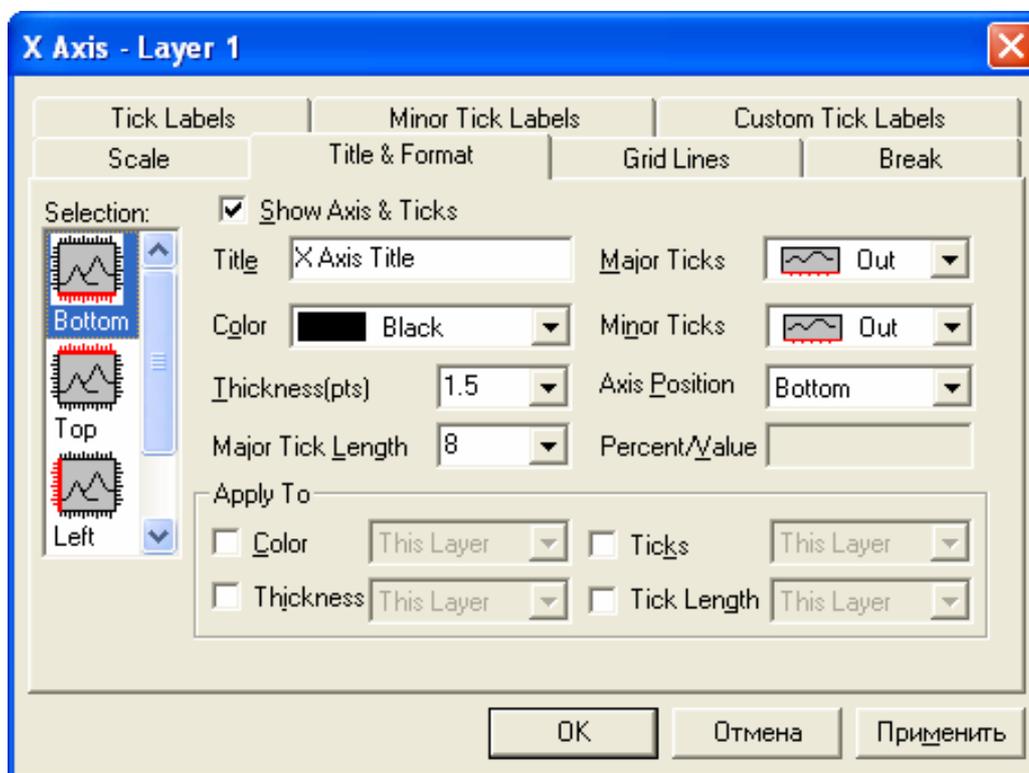


Рис. 2.10. Диалоговое окно для определения свойств осей

Размер отображаемой шкалы оси (как для горизонтальной, так и для вертикальной) можно установить на закладке **Scale** (Шкала) в полях **From** (От) и **To** (До). На закладке **Title&Format** (Заголовок и формат) можно задавать название осей в поле **Title** (Заголовок). Но в нашем случае лучше воспользоваться другим способом.

Например, на предлагаемой стандартной подписи к оси **Y** щелкните правой кнопкой мыши, в контекстном меню выберите пункт **Properties** (Свойства), появится окно **Text Control** (Управление текстом), в котором и присвойте оси новое имя – **Wavenumber (cm⁻¹)** (рис. 2.11).

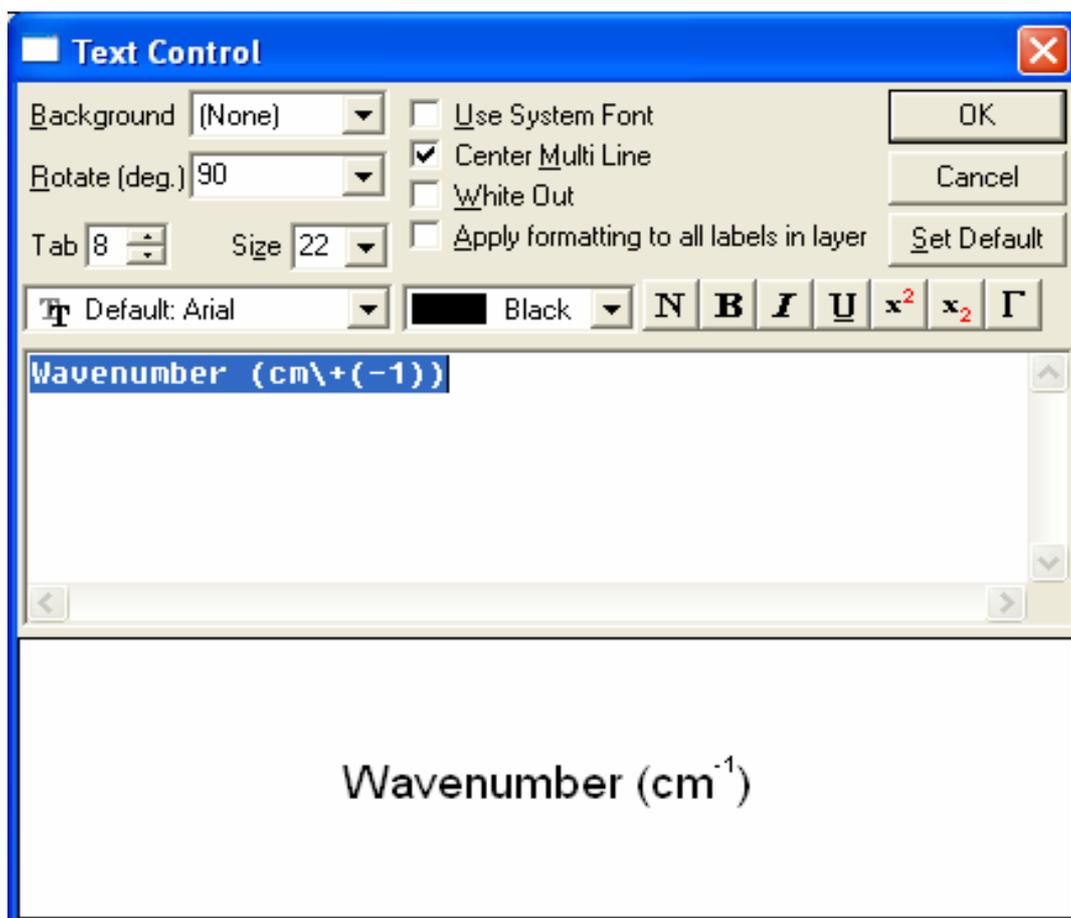


Рис. 2.11. Изменение названия оси

Параметры подписей также можно изменять. Аналогичным способом замените стандартную подпись к оси **X**, присвоив ей название **Температура, К**. Для корректного отображения русских букв рекомендуется использовать любой русифицированный шрифт, т.е. шрифт, имеющий в названии указание **Сур** (кириллица), например, **Arial Сур**¹. В результате проделанной работы ваш график должен иметь следующий вид (рис. 2.12):

¹ В дальнейшем нам потребуется использовать в надписях греческие буквы. Переход на греческий алфавит осуществляется нажатием кнопки с буквой **Г**. Букве *a* будет соответствовать α , *b* – β и т.д.

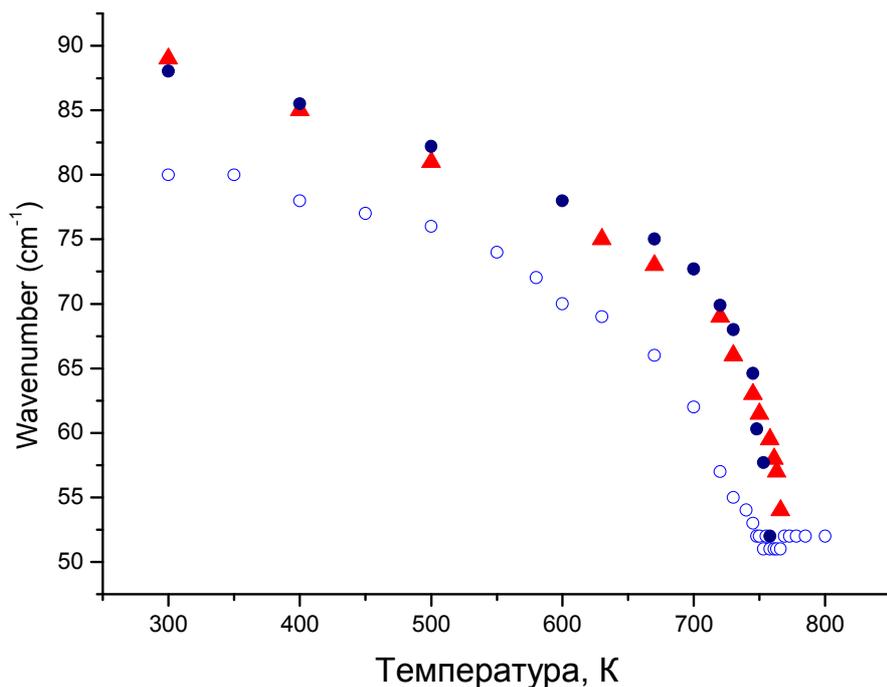


Рис. 2.12. Зависимость волнового числа от температуры

Для отображения на графике зависимости полуширины (Γ) E (1TO) мягкой моды в монокристалле PbTiO_3 и поликристаллической пленки от температуры по данным, представленным в таблице на рис. 2.1, проделайте действия, описанные выше, и получите следующий результат (рис. 2.13):

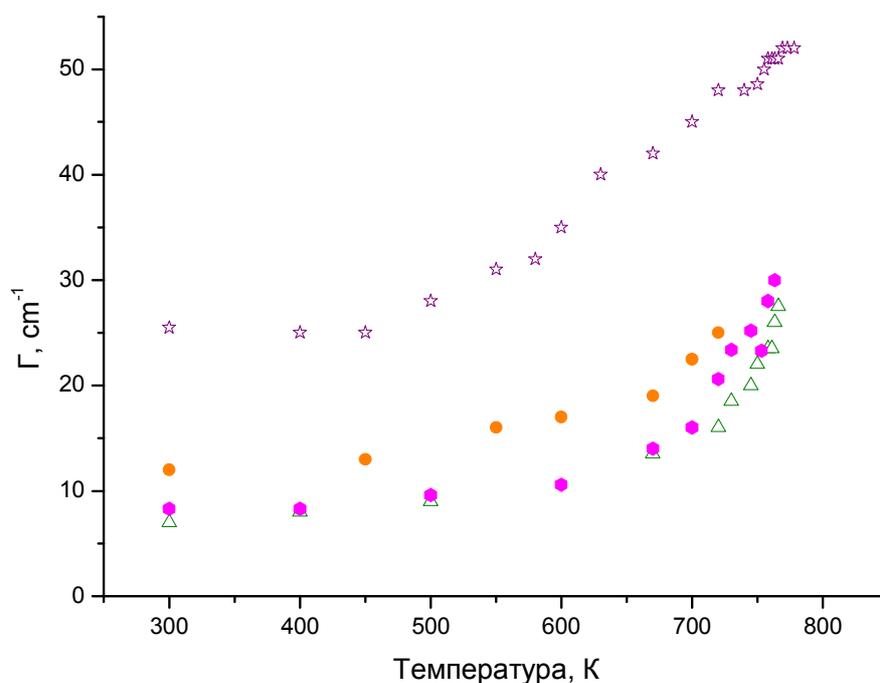


Рис. 2.13. Зависимость полуширины мягкой моды от температуры

Температурная зависимость полуширины (Γ) мягкой моды аппроксимируется полиномом (2.1):

$$\Gamma = \Gamma_0 + aT + bT^2. \quad (2.1)$$

Для отображения этого полинома на графике на панели инструментов в меню Analysis (анализ) выберите пункт Non-linear Curve Fit (нелинейная аппроксимация) и в выпадающем списке щелкните Advanced Fitting Tool (расширенный инструмент для аппроксимации) (рис. 2.14).

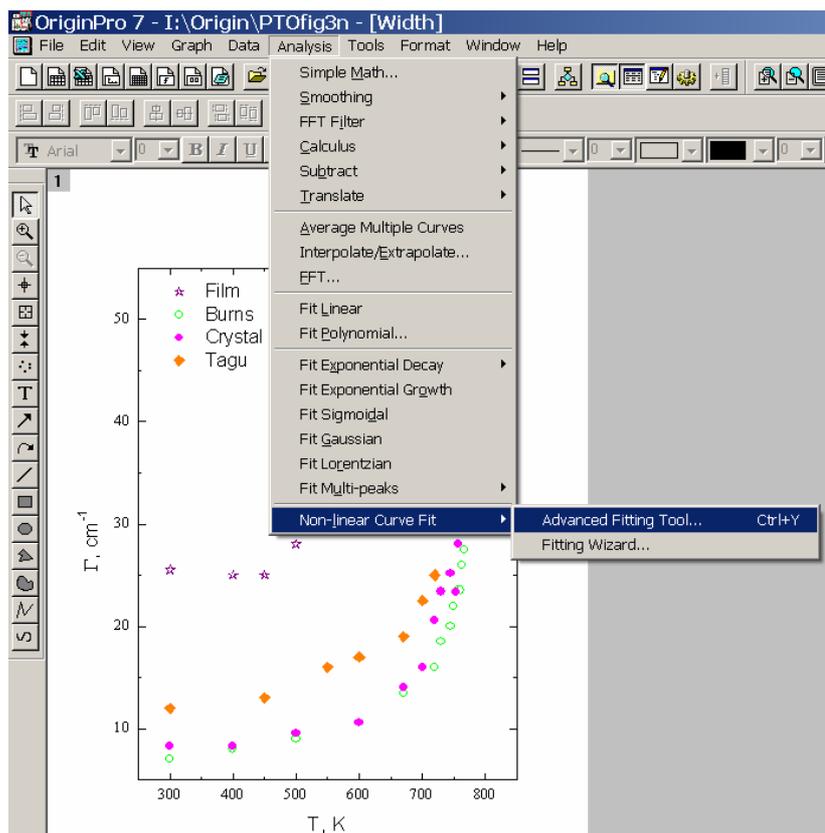


Рис. 2.14. Меню анализа данных

У вас должно появиться окно NonLinear Curve Fitting (рис. 2.15).

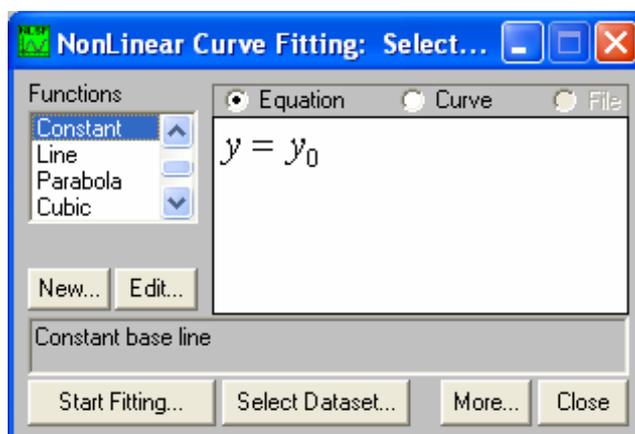


Рис. 2.15. Окно нелинейной аппроксимации

В списке **Functions** (функции) выберите полином 2-ой степени (**Parabola**), который автоматически отобразится в окне формул (рис. 2.16).

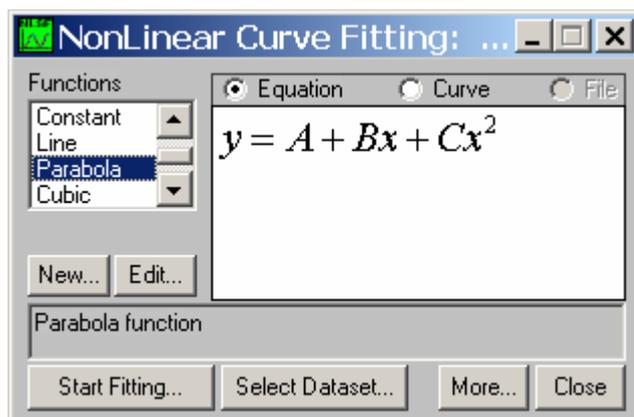


Рис. 2.16. Выбор функции

При нажатии на кнопку **Select Dataset** (выбор набора данных) произойдет смена окна, и в списке **Available Dataset** (доступные наборы данных) среди представленных данных, выберите те, которые относятся к температурной зависимости полуширины (Γ) мягкой моды. Щелкните дважды по одному из необходимых наборов; в списке **Variables** ему присваивается значение **Dep** (зависимый), а значение **Indep** (независимый) присваивается автоматически (рис. 2.17).

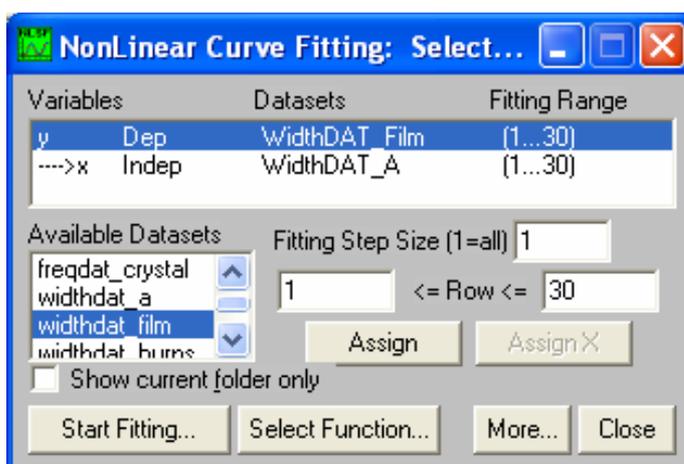


Рис. 2.17. Выбор необходимого набора данных

После выбора набора данных и подгоночного полинома можно проводить аппроксимацию. Для этого щелкните по кнопке **Start Fitting** (начать аппроксимацию), снова произойдет смена окна, в котором в поле **Value** представлены значения параметров полинома (рис. 2.18), а на графике отобразится кривая (рис. 2.19).

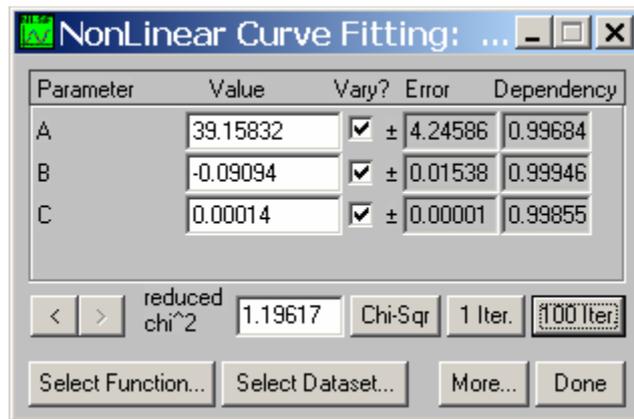


Рис. 2.18. Значения параметров полинома

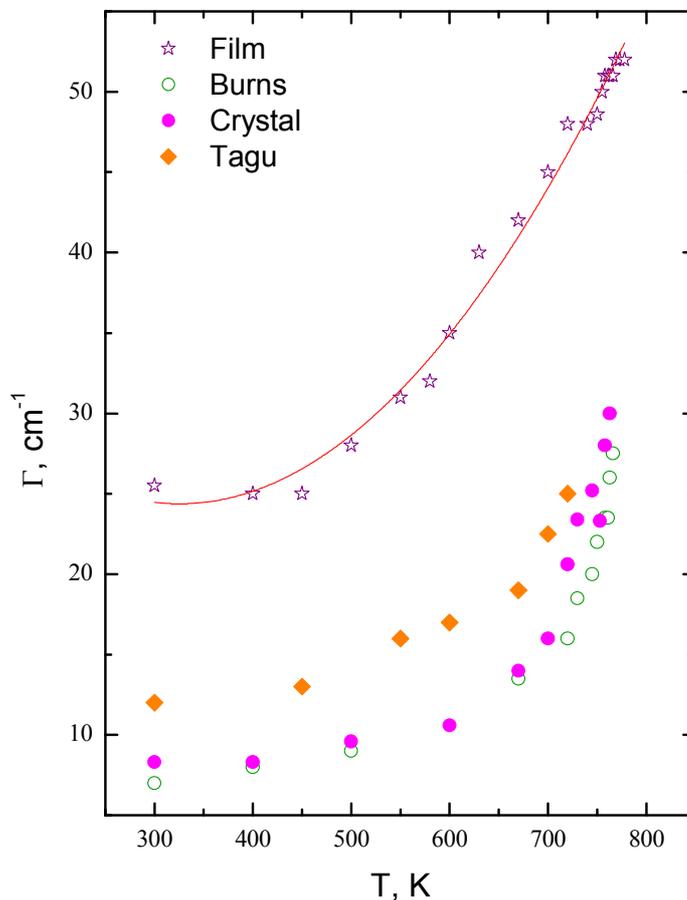


Рис. 2.19. Результат аппроксимации полиномом

Для того, чтобы кривая стала более гладкой, в появившемся окне вам потребуется один или несколько раз нажать специальную кнопку **100 Iter** (100 итераций), пока значения параметров не перестанут меняться.

Теперь аппроксимацию необходимо провести для остальных наборов данных. Нажмите снова кнопку **Select Dataset** и выберите новый набор данных. Затем выберите функцию, нажав кнопку **Select Functions**, и для того чтобы аппроксимировались новые данные, необходимо произвести обновление, нажав на кнопку **New** (новый). Появится окошко **Attention** (внимание), в котором вам потребуется подтвердить, что вы действительно хотите закончить аппроксимацию предыдущего набора, нажав кнопку **Yes** (да) (рис. 2.20).

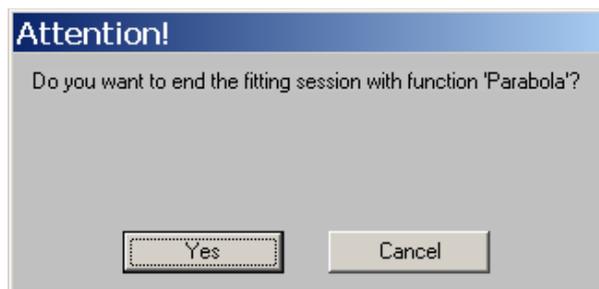


Рис. 2.20.

Результат аппроксимации представлен на рис. 2.21. Значения параметров отображаются в протоколе результатов **Results Log**. В сменившемся окне (рис. 2.22) нажмите кнопку **Accept** (принять), и только после этого начните аппроксимацию (**Start Fitting**).

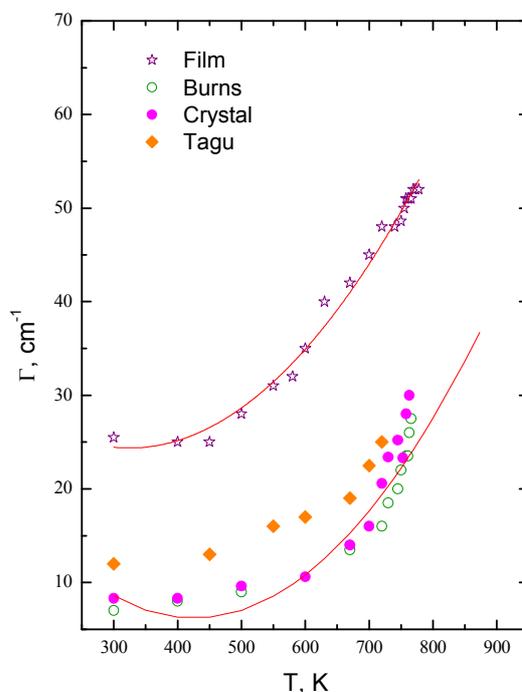


Рис. 2.21. Результат аппроксимации второго набора данных

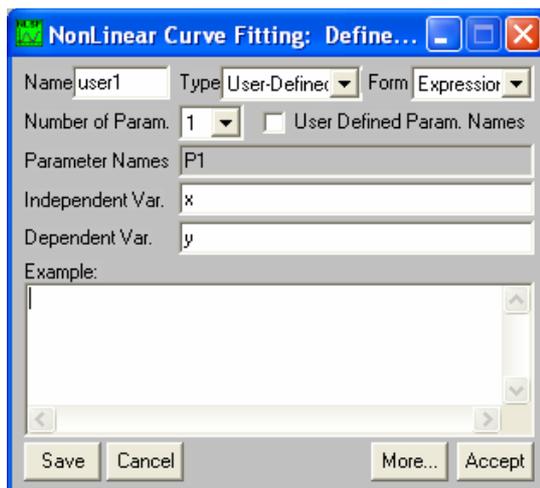


Рис. 2.22.

Все аналогичные действия проделайте для двух оставшихся наборов данных, относящихся к зависимости полуширины мягкой моды. Редактирование проведите известными вам способами. В итоге вы должны получить графики, представленные на рис. 2.23. В большинстве случаев аппроксимацию полиномами можно проводить существенно более простым способом, просто выбрав пункт меню **Analysis / Fit Polynomial**.

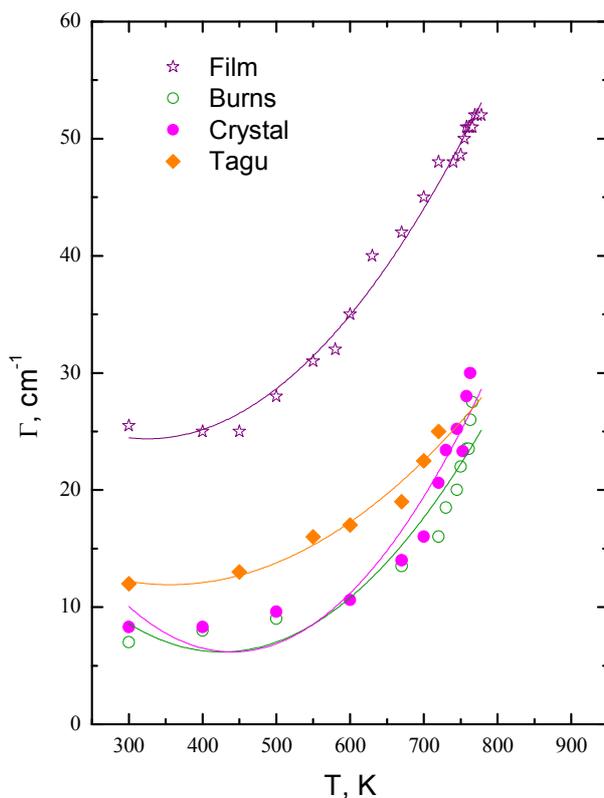


Рис. 2.23. Результат аппроксимации всех наборов данных

Упражнение. Проведите аппроксимацию полуширины мягкой моды, используя **Analysis / Fit Polynomial**.

Для всех наборов данных, относящихся к температурным зависимостям частоты мягкой моды, необходимо провести те же действия. Аппроксимируется данная зависимость функцией вида

$$v = A \cdot (T_c - T)^\alpha, \quad (2.2)$$

где $T_c = 766$ К для титаната свинца.

В стандартном наборе пакета Origin, как уже отмечалось ранее, имеется огромный список функций, но иногда возникает необходимость прибегнуть к введению своей функции. Создать запись можно в окне **NonLinear Curve Fitting** после нажатия на кнопку **New** (новый). В появившемся окне в поле **Name** (имя) задайте имя вашей функции, либо пакет Origin автоматически присвоит ей имя **User** (пользователь). В списке **Form** (форма) выберите **Y-Script**. В списке **Number of Param.** (количество параметров) укажите, сколько параметров вам понадобится при записи новой функции. В нашем случае количество параметров – 2 (A, α), и они автоматически отображаются в поле **Parameter Name** (имя параметра). Задайте независимую переменную x в поле **Independent Var** и зависимую переменную y в поле **Dependent Var**. А теперь в окне **Example** (пример) задайте вид новой функции

$$y = P1 * (766 - x) ^ P2.$$

Для проведения аппроксимации нужно задать значение параметров P1 и P2. Нажмите кнопку **More** (дополнительно) и в пункте меню **Scripts** выберите **Parameter Initialization** (инициализация параметров). В списке **Init.Value** задайте значения этих параметров, поставьте галочки в пунктах **Parameter Initialization** (инициализация параметров) и **Compile** (компиляция) (рис. 2.24).

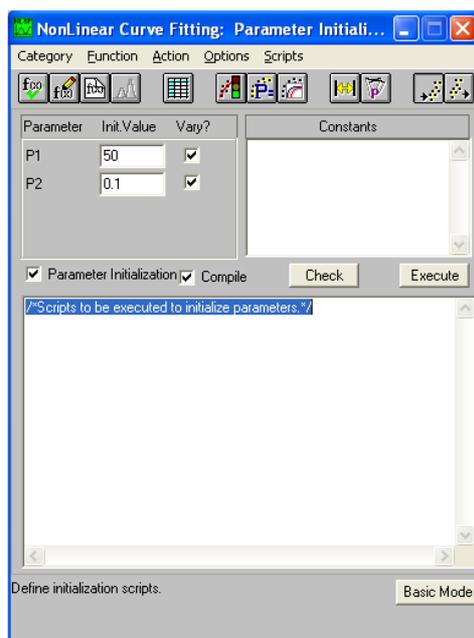


Рис. 2.24. Окно инициализации параметров

Заданные значения параметров P1 и P2 являются приблизительными, поэтому во время аппроксимации для лучшего результата их можно варьировать, если конечно это будет необходимо. Полученную функцию необходимо сохранить для дальнейшего использования, выбрав на панели меню **Function** (функция) и нажав пункт **Save** (рис. 2.25).

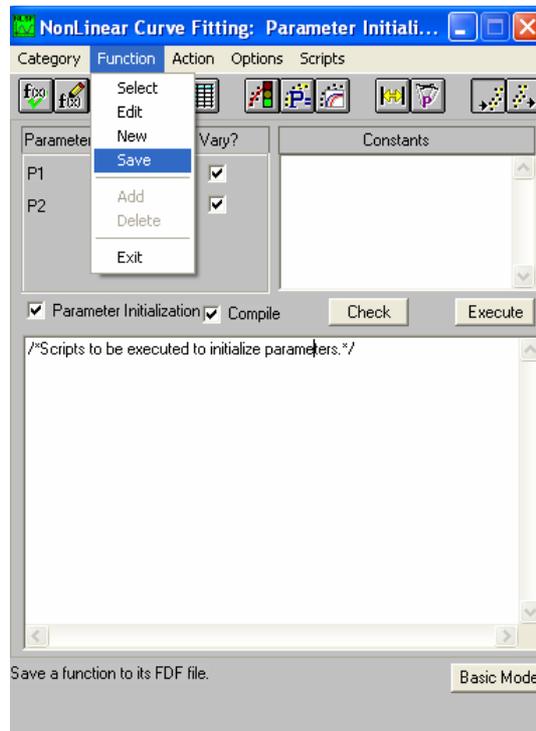


Рис. 2.25. Сохранение начальных значений параметров

Затем, нажав клавишу **Basic Mode** (основной режим), вы возвратитесь к первоначальному окну. Выбирая поочередно нужные наборы данных для температурных зависимостей частоты мягкой моды, выполните аппроксимацию. В результате после соответствующего форматирования получите графики, представленные на рис. 2.26.

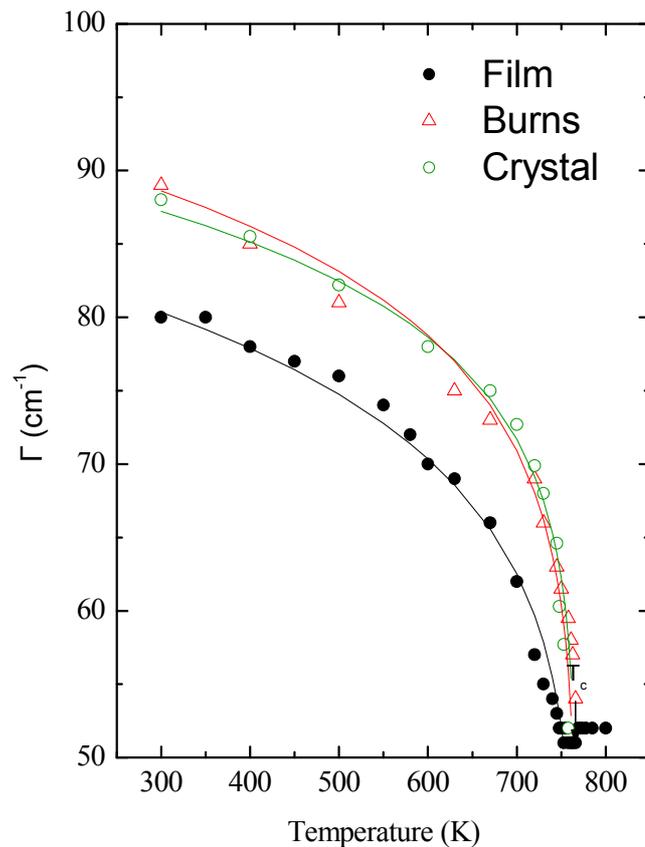


Рис. 2.26. Результат аппроксимации функцией вида (2.2)

Параметры аппроксимации приведены ниже в виде протокола результатов

Data: FreqDAT_Burns
 Model: user5
 Equation: $y = P1*(766-x)^{P2}$
 Weighting:
 y No weighting

Chi 2 /DoF	R 2
625.0644	-3.98671

Parameter	Value	Error
P1	38.74427	10.82824
P2	0.11711	0.05912

[07.11.2007 10:29 "/Frequency" (2454411)]
 Data: FreqDAT_Crystal

Model: user5
Equation: $y = P1*(766-x)^{P2}$
Weighting:
y No weighting

Chi²/DoF R²

268.26963 -0.92782

Parameter	Value	Error
P1	48.72723	9.42345
P2	0.09235	0.0428

[07.11.2007 10:30 "/Frequency" (2454411)]
Data: FreqDAT_Crystal
Model: user5
Equation: $y = P1*(766-x)^{P2}$
Weighting:
y No weighting

Chi²/DoF R²

3.51163 0.97484

Parameter	Value	Error
P1	44.0089	1.21017
P2	0.1139	0.00586

3. Смещение графиков

В файле BStat77K приведена таблица, которая состоит из 5 колонок: колонка А – частота, а остальные 4 колонки – интенсивности экспериментальных спектров (титаната бария, твердого раствора 70% Ва и 30 % Sr, твердого раствора 50% Ва и 50 % Sr, твердого раствора 30% Ва и 70 % Sr соответственно). Спектры сняты при одинаковых условиях эксперимента и частотные шкалы у них совпадают. Если построить все эти графики, используя навыки отображения данных, на одном и том же рисунке, то получится, что все 4 спектра практически наложатся друг на друга. И даже используя различные цвета, нелегко понять, что к чему относится (рис. 3.1).

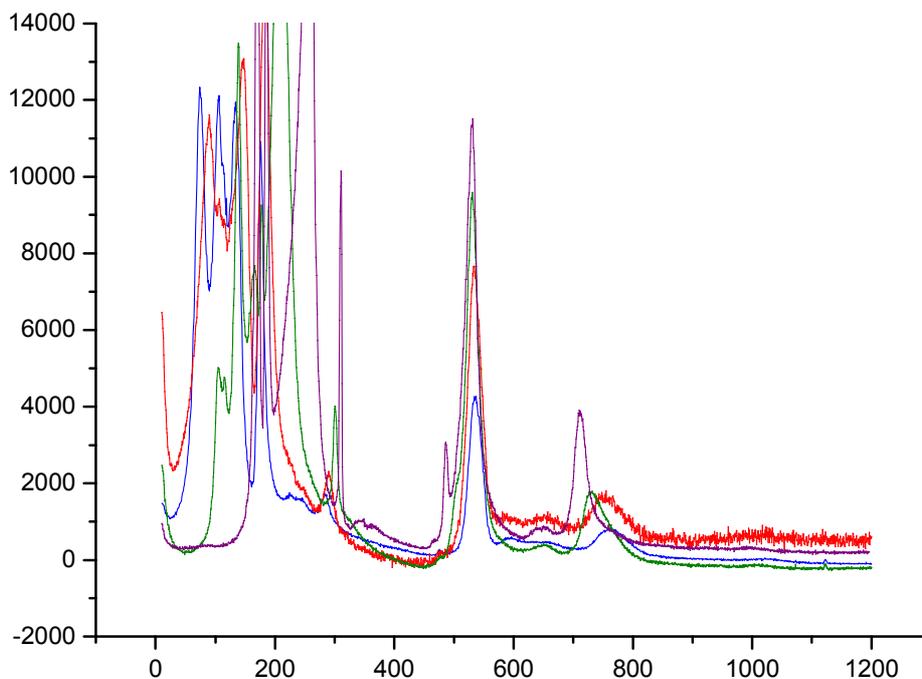


Рис. 3.1. Четыре графика на одном рисунке

Поэтому удобно было бы спектры сдвинуть. В пакете Origin для этого имеется специальная функция Waterfall (водопад). Выделив все колонки таблицы, на панели инструментов в меню Plot (график) выберите пункт Special Line/ Symbol (специальные линии/ символы). В выпадающем списке найдите функцию Waterfall (водопад) (рис. 3.2), и как только вы щелкните по ней, все спектры, которые раньше были наложенными друг на друга, окажутся автоматически смещенными по осям X и Y (рис. 3.3).

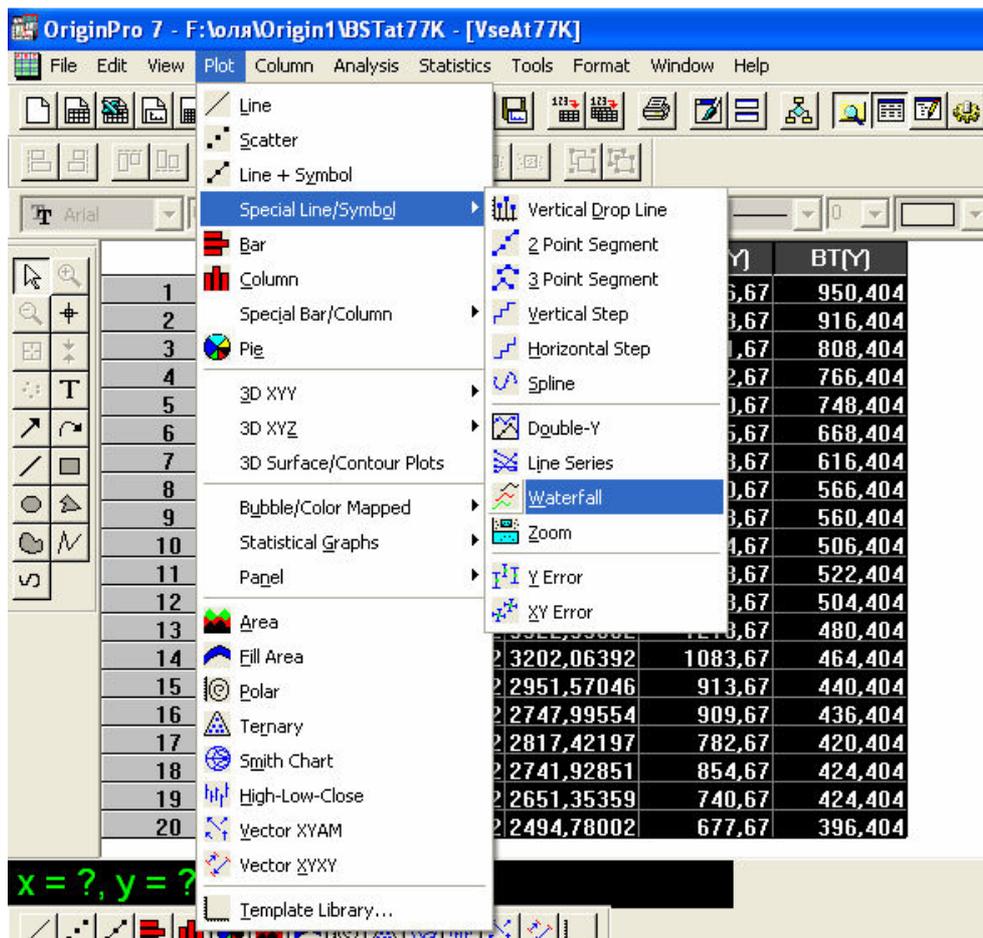


Рис. 3.2. Выбор типа графика Waterfall

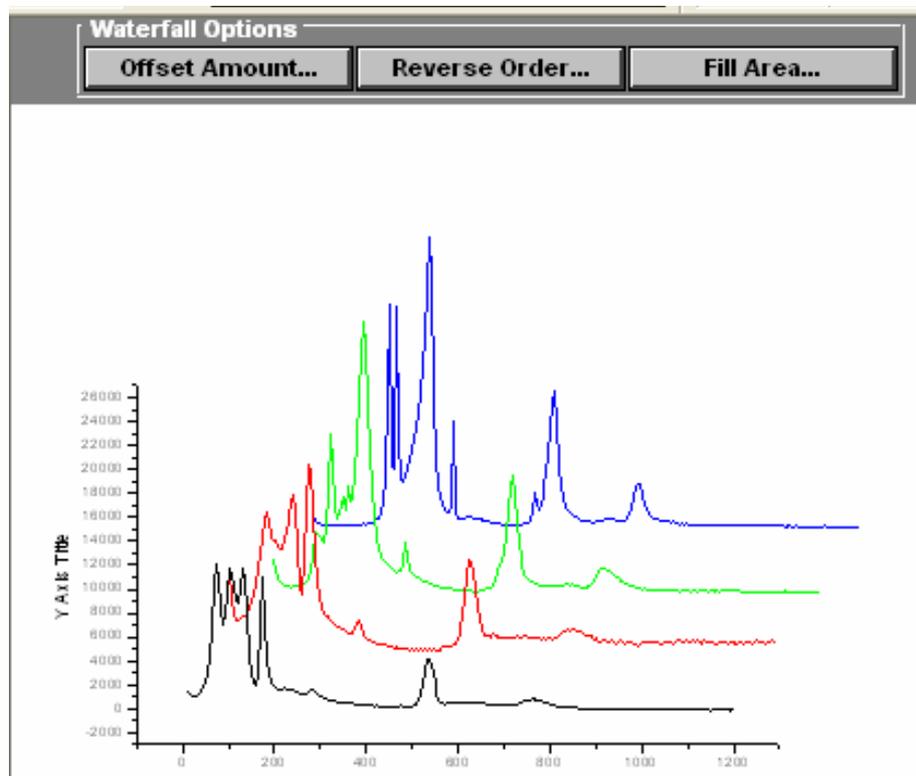


Рис. 3.3. Окно опций Waterfall

Т. к. частотные шкалы спектров совпадают, то логично было бы сме-

стить графики только по оси Y. У функции **Waterfall** (водопад) имеются некоторые опции, которые при смещении графиков автоматически открываются в виде узкой панели **Waterfall Options** в верхней части рисунка (рис. 3.3). Это следующие опции: **Offset Amount** (величина смещения), **Reverse Order** (обратный порядок), **Fill Area** (заливка). Для смещения графиков только по оси Y воспользуйтесь опцией **Offset Amount** (величина смещения). После нажатия на эту кнопку у вас появится окно (рис. 3.4), в котором в списке **XY offset** (смещение по XY) выберите состояние **Enable** (допустимый), в списке **Total Y offset (%)** (смещение по оси Y в %) установите значение, соответствующее будущему смещению графиков, а в списке **Total X offset (%)** (смещение по оси X в %) задайте значение 0. После чего нажмите **OK**.

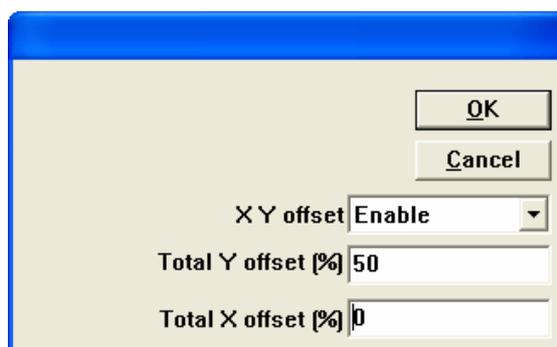


Рис. 3.4. Настройка параметров смещения графиков

В результате график примет следующий вид (см. рис. 3.5).

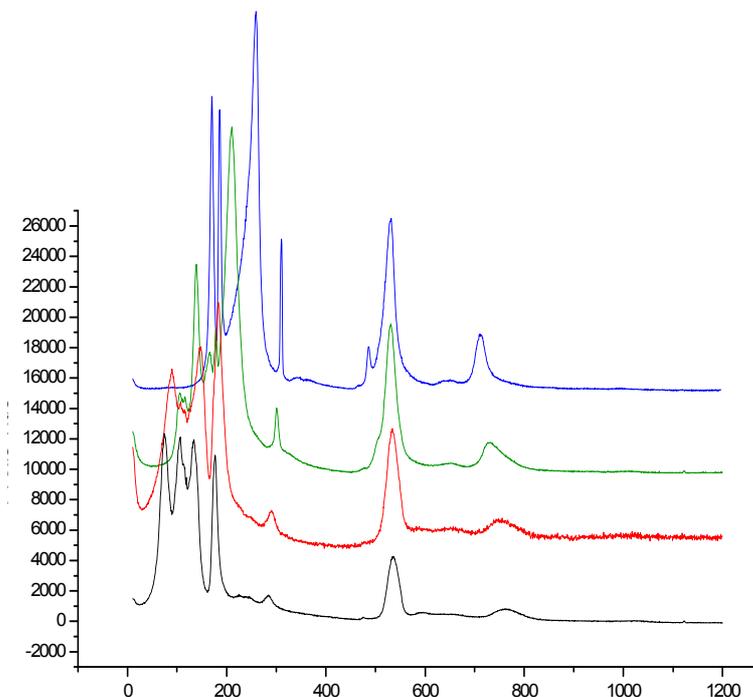


Рис. 3. 5. Графики, смещенные вдоль оси ординат

Спектры можно сдвигать и вручную. В этом случае к спектру прибавляется постоянный фон. При таком подходе величину сдвига можно сделать разной. Иногда это удобно. Для этого значения колонки В оставьте постоянными, а к остальным колонкам, используя опцию **Set Column Values** (задать значение колонки), прибавьте числа в зависимости от величины сдвига. В результате получится следующий график (рис. 3.6):

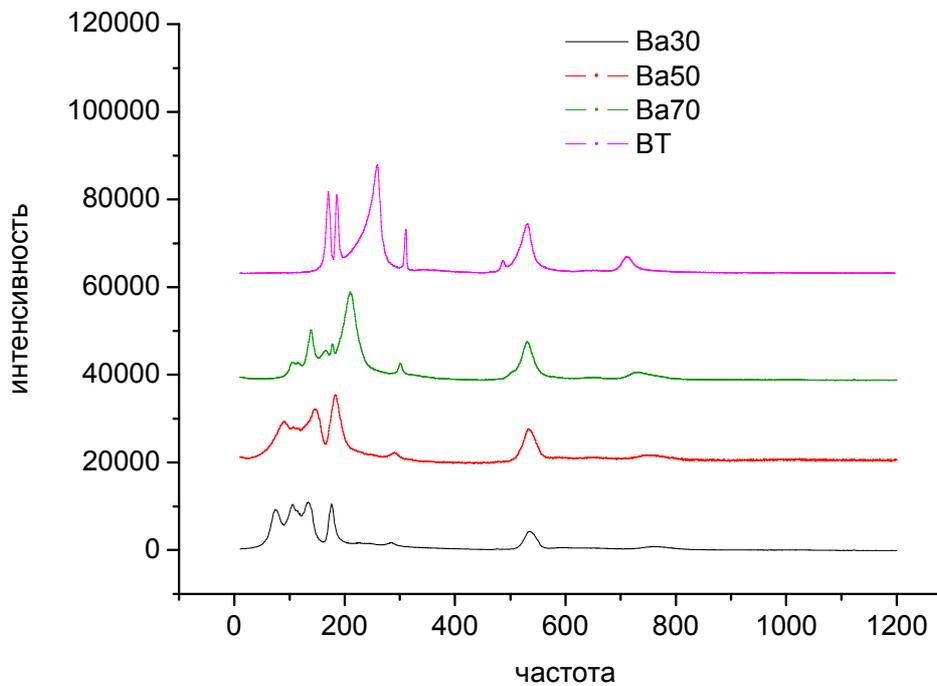


Рис. 3.6. Результат смещения графиков вручную

4. Совмещение графиков

В файле PTOFIG1 приведены данные спектров для двух поляризаций кристалла PbTiO_3 (VV и VH) и пленки PbTiO_3 . Импортируем эти данные и отобразим все три спектра на одном рисунке с разными шкалами интенсивности. Известно, что интенсивность спектра пленки намного меньше, поэтому для отображения графиков на одной плоскости воспользуемся встроенным в пакет Origin шаблоном Double-Y (совмещение графиков) для создания подобных рисунков. Убедитесь, что в вашей таблице колонки A, B, C, D имеют роли X, Y, Y, Y соответственно. Теперь выделите все колонки таблицы. На выделенном участке щелкните правой кнопкой мыши, появится контекстное меню (рис. 4.1), в котором в меню Plot (график) выберите пункт Special Line/ Symbol (специальные линии/ символы) и в выпадающем списке выберите шаблон Double-Y (совмещение графиков).

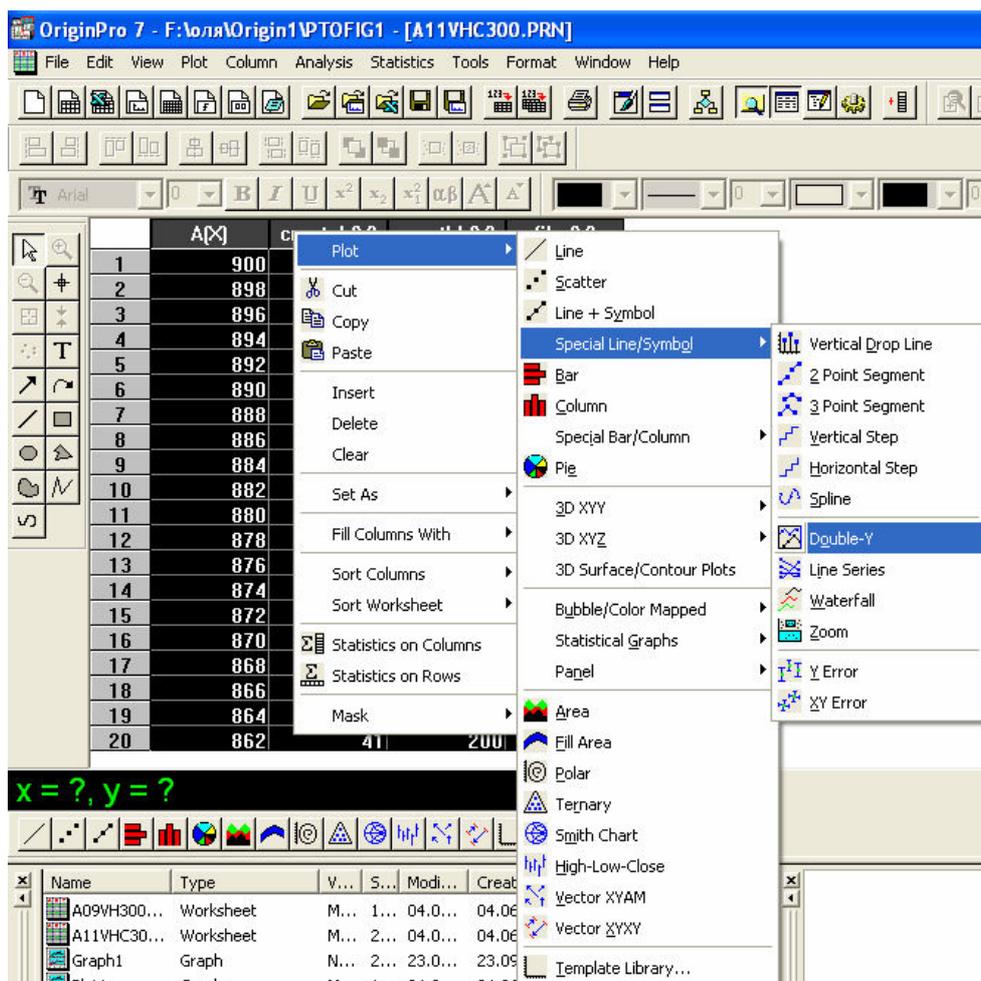


Рис. 4.1. Шаблон для построения совмещенных графиков

В результате проделанных действий должен отобразиться график (рис. 4.2). Как видно, пакет Origin автоматически подобрал шкалу для интенсивности спектра пленки (на экране это синяя кривая на графике и соответствующая ей синяя координатная ось). Все координатные оси должны начинаться с 0. Редактирование внешнего вида графиков и подписей осей проведите известным вам способом.

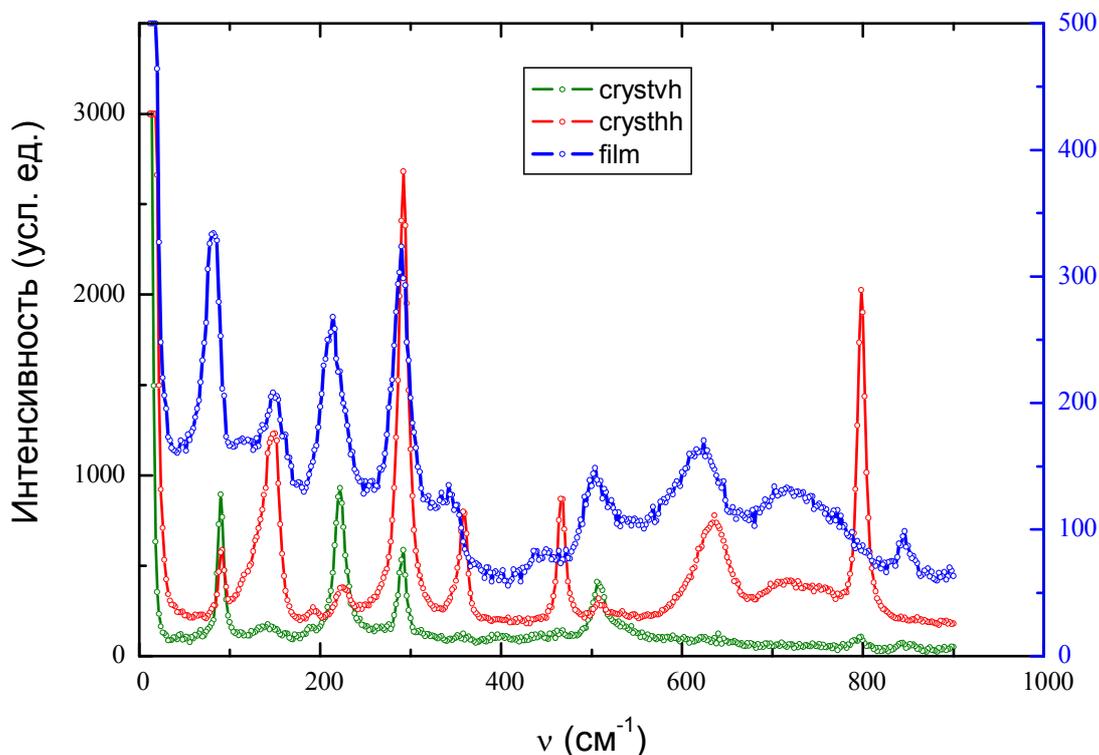


Рис. 4.2. Результат использования шаблона Double-Y

Для того чтобы было более понятно, к чему относится тот или иной график, добавим на рисунок текстовые комментарии. Для этого на пустом месте щелкните правой кнопкой мыши, в контекстном меню выберите пункт **Add Text** (добавить текст). Появится маленькое окошко с курсором внутри. Введите текст ПЛЕНКА. Если возникли проблемы с шрифтом, то выделив эту надпись, щелчком правой кнопки мыши вызовите меню, в котором выберите пункт (свойства). Выберите в списке самый оптимальный вариант – шрифт **Arial CYR**. Теперь переместите данную надпись к кривой, которая соответствует поляризации пленки (синяя кривая на экране). Создайте аналогичным способом комментарии для случаев, когда поляризация падающего излучения параллельна поляризации рассеянного (VV) (красная кривая на экране), и когда поляризация падающего излучения перпендикулярна поляризации рассеянного (VH) (зеленая кривая на экране). Разумно было бы указать принадлежность графика для поляризации пленки к соответствующей координатной оси при помощи стрелочки, которую можно найти на панели инструментов, находящейся слева (рис. 4.3).

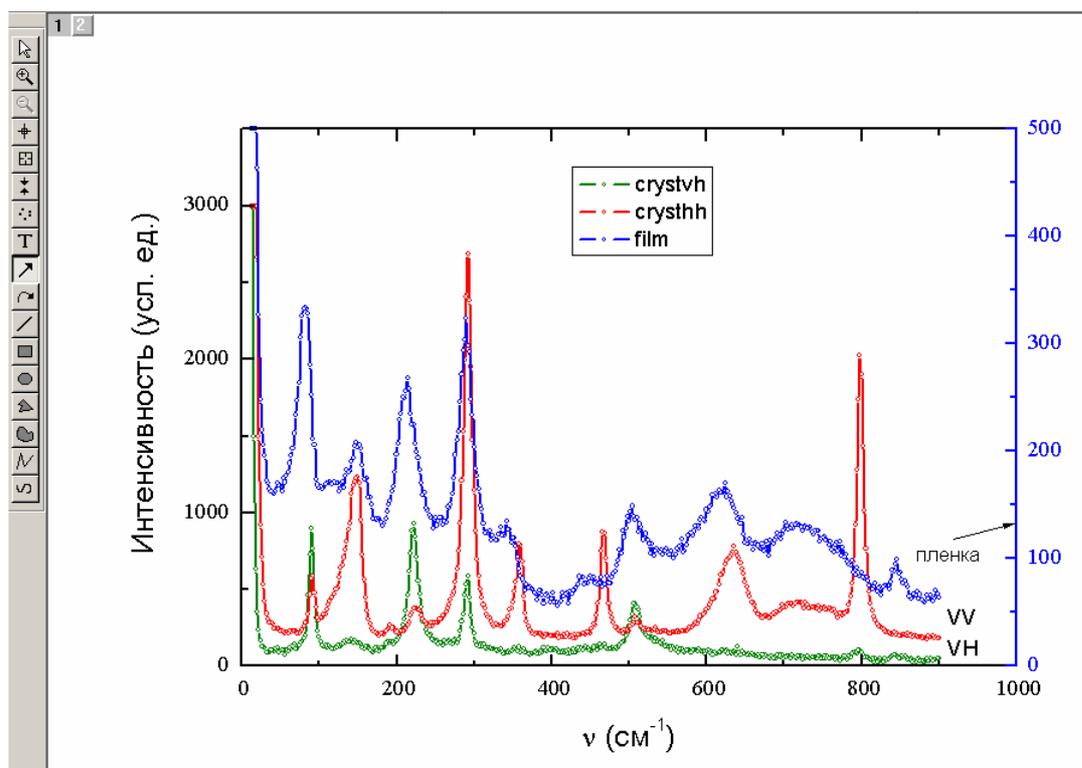


Рис. 4.3. Добавление стрелки на рисунок

5. Несколько слоев

Импортируйте файл PTOFIG2, в котором содержатся экспериментальные данные температурных зависимостей спектров комбинационного рассеяния света (КРС) монокристалла PbTiO_3 и поликристаллической пленки на подложке $(001)\text{MgO}$. Не трудно догадаться, что должно получиться 4 графика. Для удобства можно разместить их на одном рисунке. Что собственно мы и будем делать в этом разделе. Для начала отобразите эти данные в виде графиков типа Line (линия), проведите их редактирование, добавьте на графики комментарии, с указанием соответствующей температуры. В результате должны получиться следующие графики (рис. 5.1–5.4).

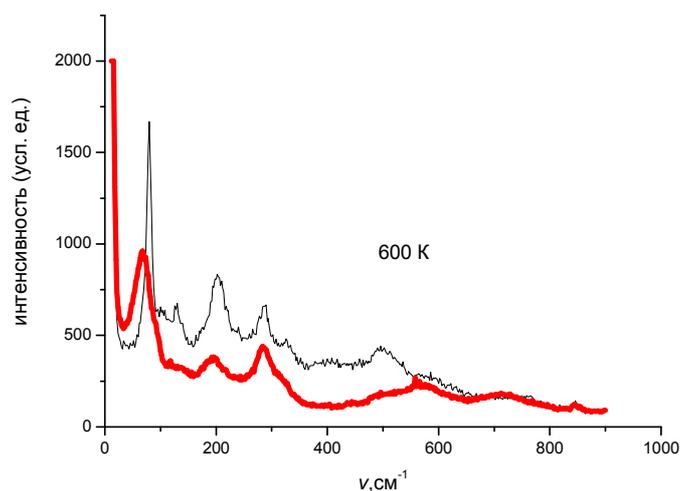


Рис. 5.1.

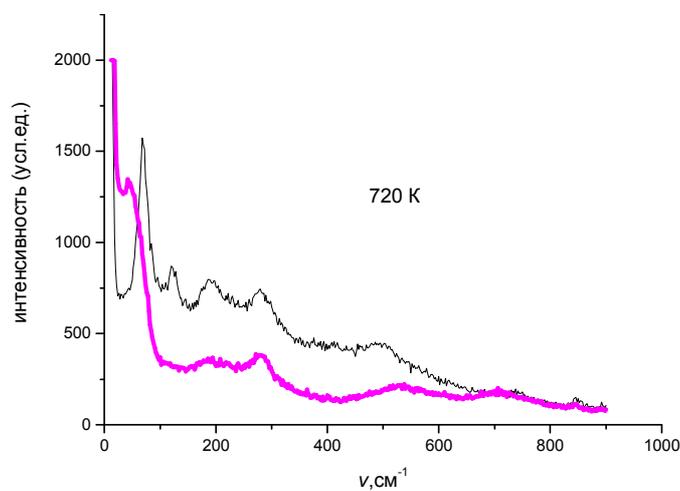


Рис. 5.2.

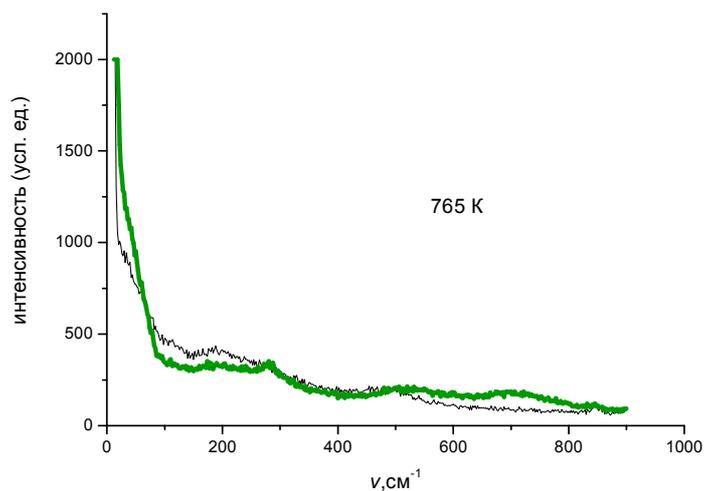


Рис. 5.3.

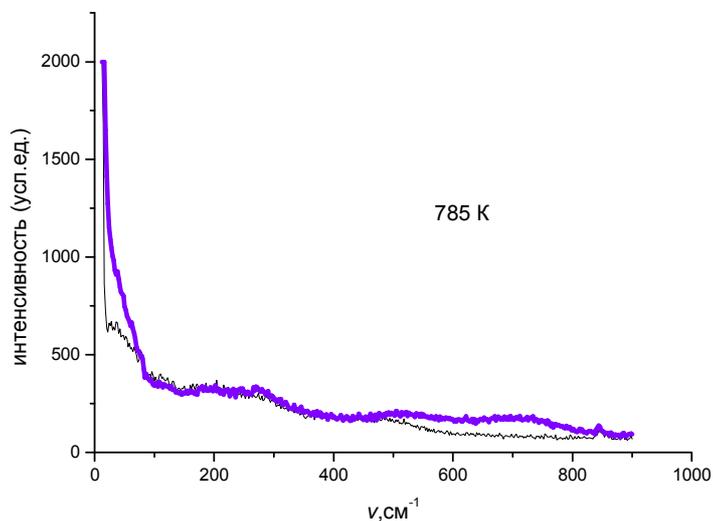


Рис. 5.4.

Цветные жирные линии соответствуют температурным зависимостям спектров КРС поликристаллической пленки на подложке (001)MgO. Для удобства можно разместить все эти графики на одном рисунке. Для этого в пакете Origin есть специальная функция Merge all Graph Windows (объединение всех графических окон), которую можно найти в пункте меню Edit (редактирование) (рис. 5.5).

В результате все полученные графики разместятся на одном рисунке (см. рис. 5.6).

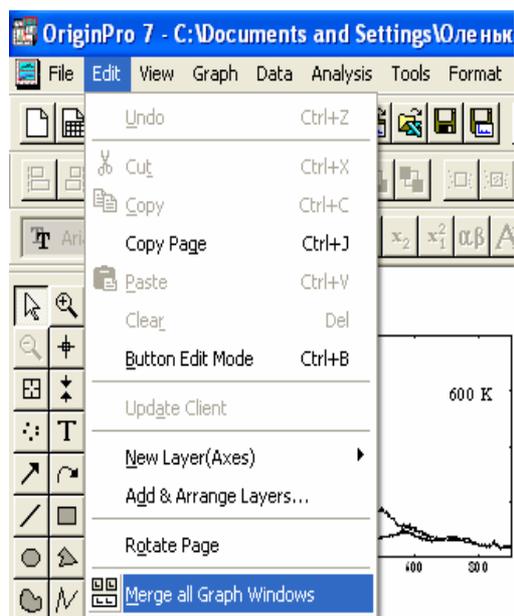


Рис. 5.5. Выбор пункта меню Merge All Graph Windows

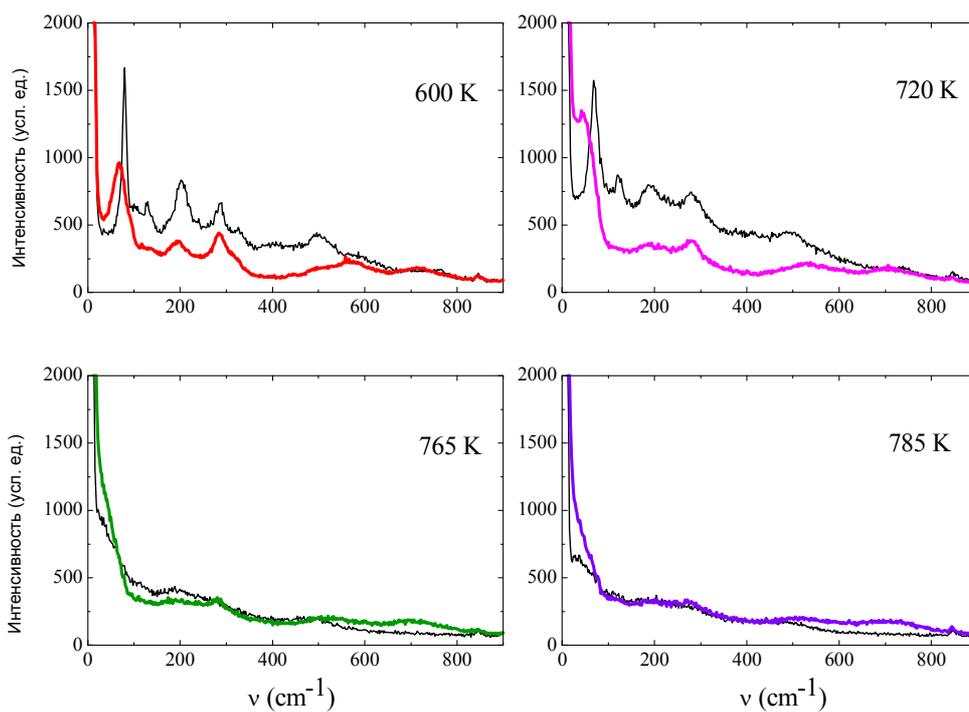


Рис. 5.6. Результат объединения всех графических окон

Иногда возникает необходимость разместить на рисунке несколько

разномасштабных графиков, и стандартная функция **Merge all Graph Windows** (объединение всех графиков окна) не совсем пригодна для этого. В этой ситуации можно воспользоваться другим способом. Для начала в первой таблице потребуется выделить колонки А и В (их роли X и Y соответственно), и отобразить эти данные в виде графика типа **Line** (линия). Получили график для монокристалла PbTiO_3 . Теперь на этом же графике, используя полученные ранее навыки, отобразите график для поликристаллической пленки (добавив в список колонки А и С). Проведите редактирование осей, внешнего вида графиков, а также добавьте комментарий с соответствующей температурой. В результате должен получиться следующий график (рис. 5.7).

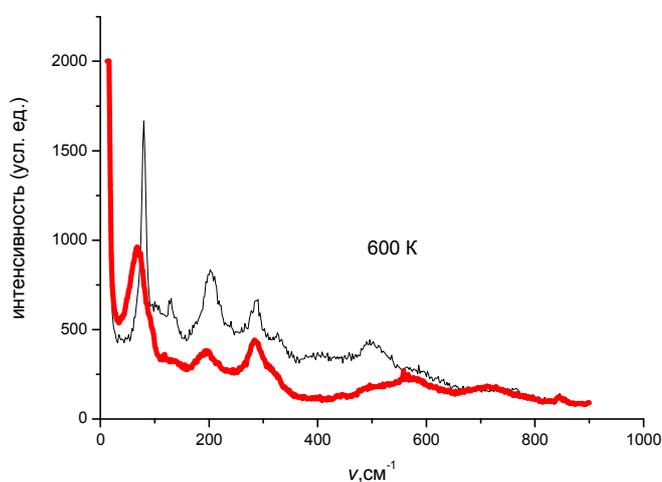


Рис. 5.7.

Теперь на панели инструментов выберите пункт меню **Tools** (инструменты), в котором выберите пункт **Layer** (слой), появится окошко **Layer** (слой) (рис. 5.8).

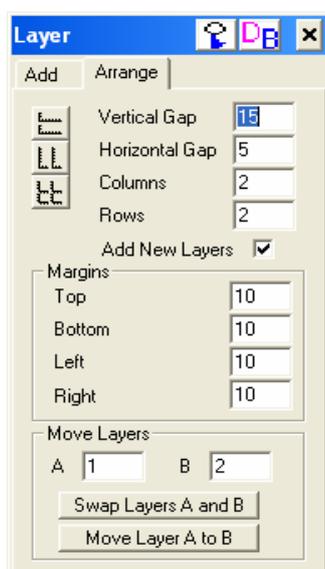


Рис. 5.8. Выбор параметров слоя

Перейдите на закладку **Arrange** (размещение) и нажмите кнопку с изображением 4-х координатных осей, после этого помимо вашего графика на рисунке появятся еще 3 дополнительные оси, с которыми вам и предстоит работать (рис. 5.9).

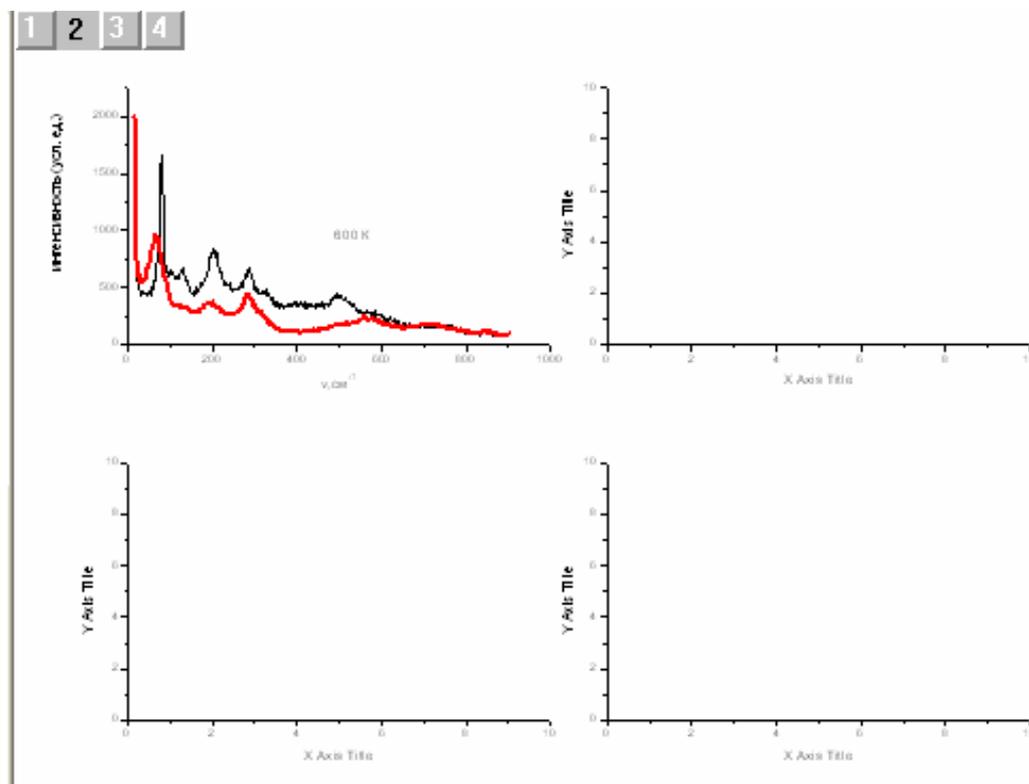


Рис. 5.9. Результат размещения трех дополнительных слоев

Подписи к осям Y (интенсивность (усл. ед.)) можно оставить на графиках 1-го и 3-го слоев, а к осям X ($\nu, \text{см}^{-1}$) – на графиках 3-го и 4-го слоев. Т.к. на первом слое у нас уже имеется график для температуры $T = 600 \text{ K}$, то начнем заполнять остальные 3 слоя. На иконке второго слоя щелкните правой кнопкой мыши и в появившемся меню выберите пункт **Add/ Remove Plot** (добавить/ удалить график) (рис. 5.10).

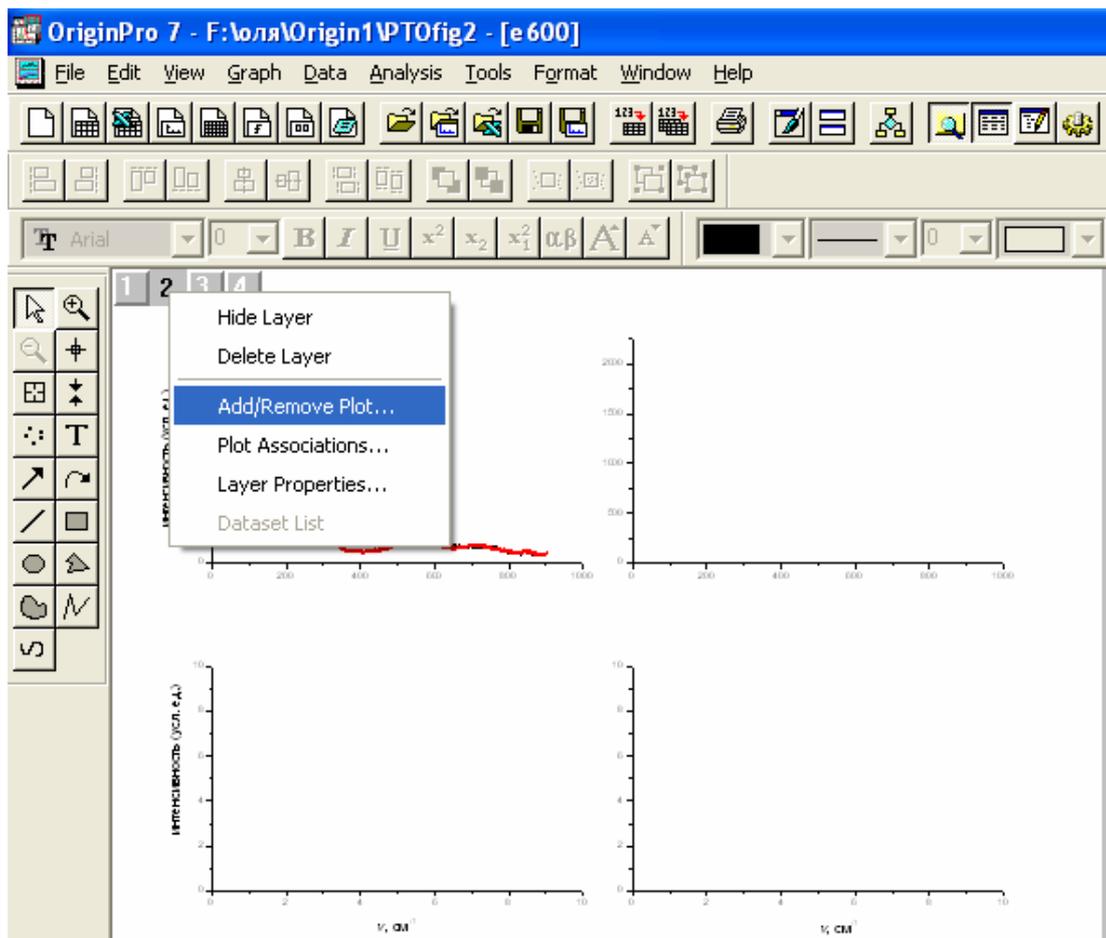


Рис. 5.10. Выбор пункта меню Add/ Remove Plot

Появится окно Layer 2 (слой 2) (рис. 5.11).

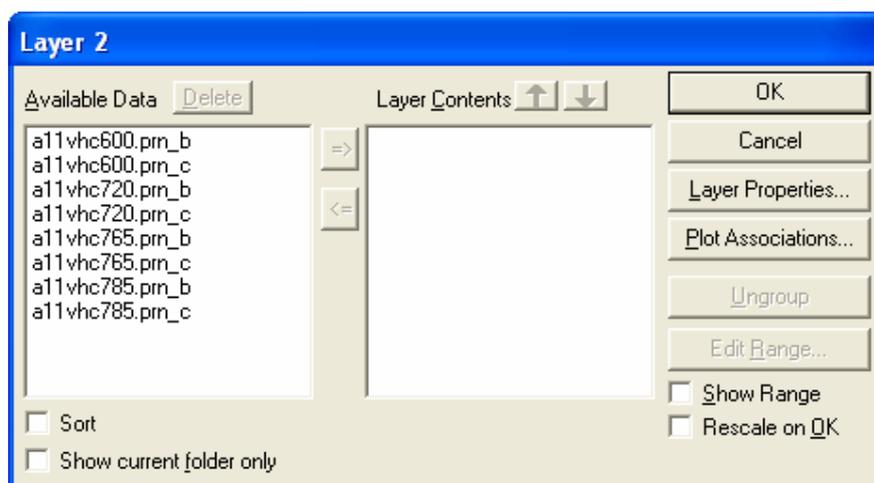


Рис. 5.11. Окно для манипуляций со слоем

В списке Available Data (доступные данные) выделите 3-ю и 4-ю строки, соответствующие температуре $T = 720$ К, с помощью стрелочки переместите набор данных в список Layer Contents (содержание слоя) и нажмите ОК (рис. 5.12).

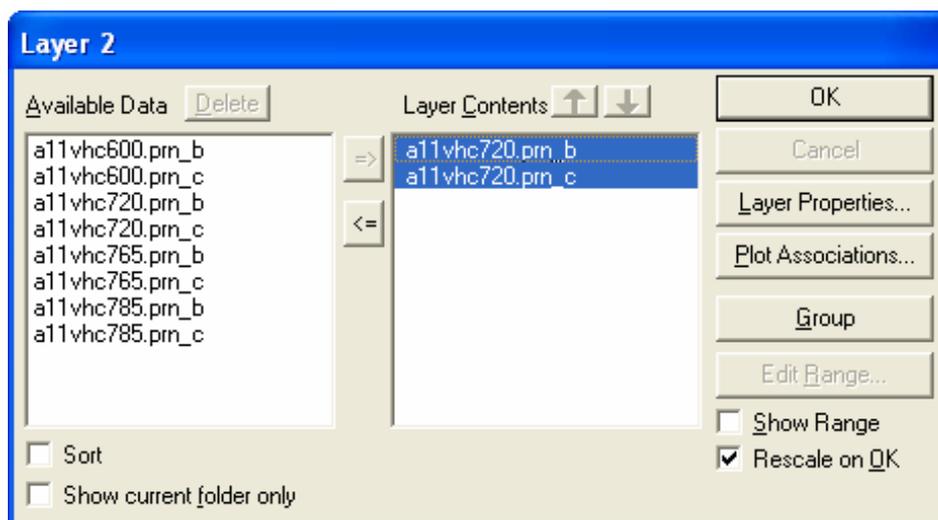


Рис. 5.12. Наборы данных второго слоя

На втором слое отобразится график, который придется подредактировать. Вы должны получить следующее (рис. 5.13).

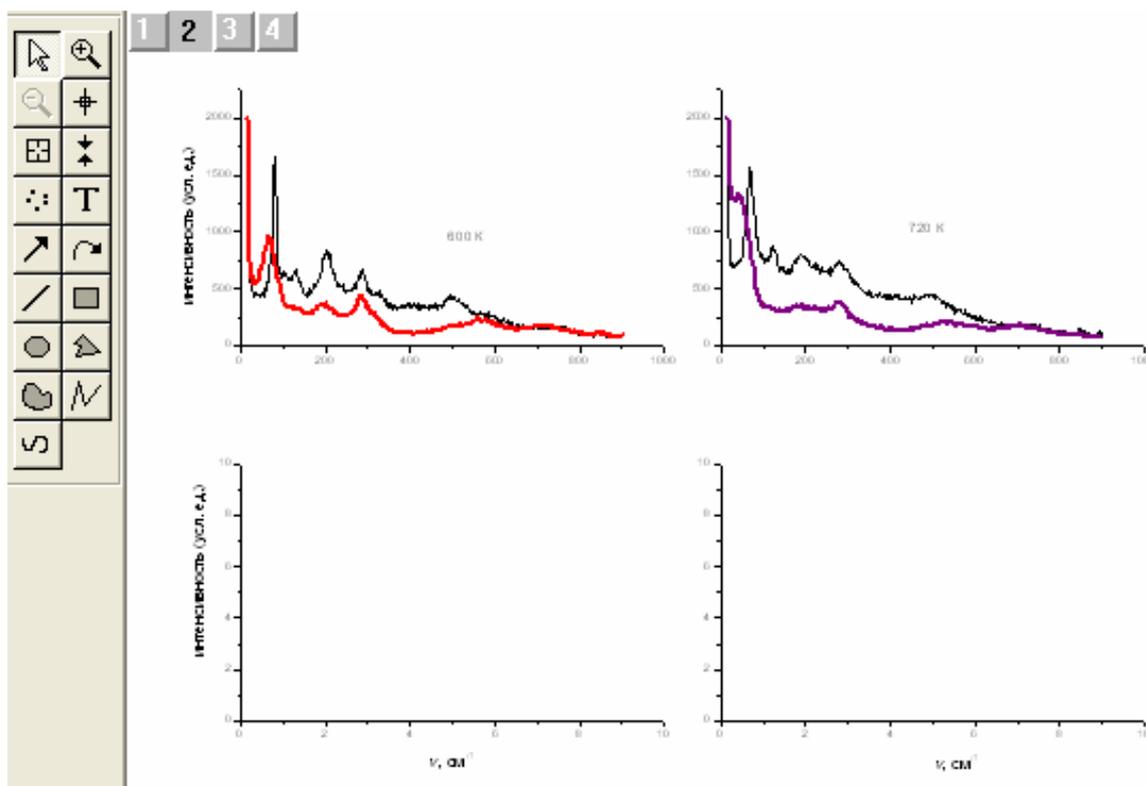


Рис. 5.13. График добавлен во второй слой

Те же действия проделайте для 3-го и 4-го слоев, добавляя на них наборы данных, соответствующие температурам $T = 765$ К и $T = 785$ К, не забывая проводить редактирование графиков. В результате вы получите следующий рисунок (рис. 5.14), схожий с рис. 5.6.

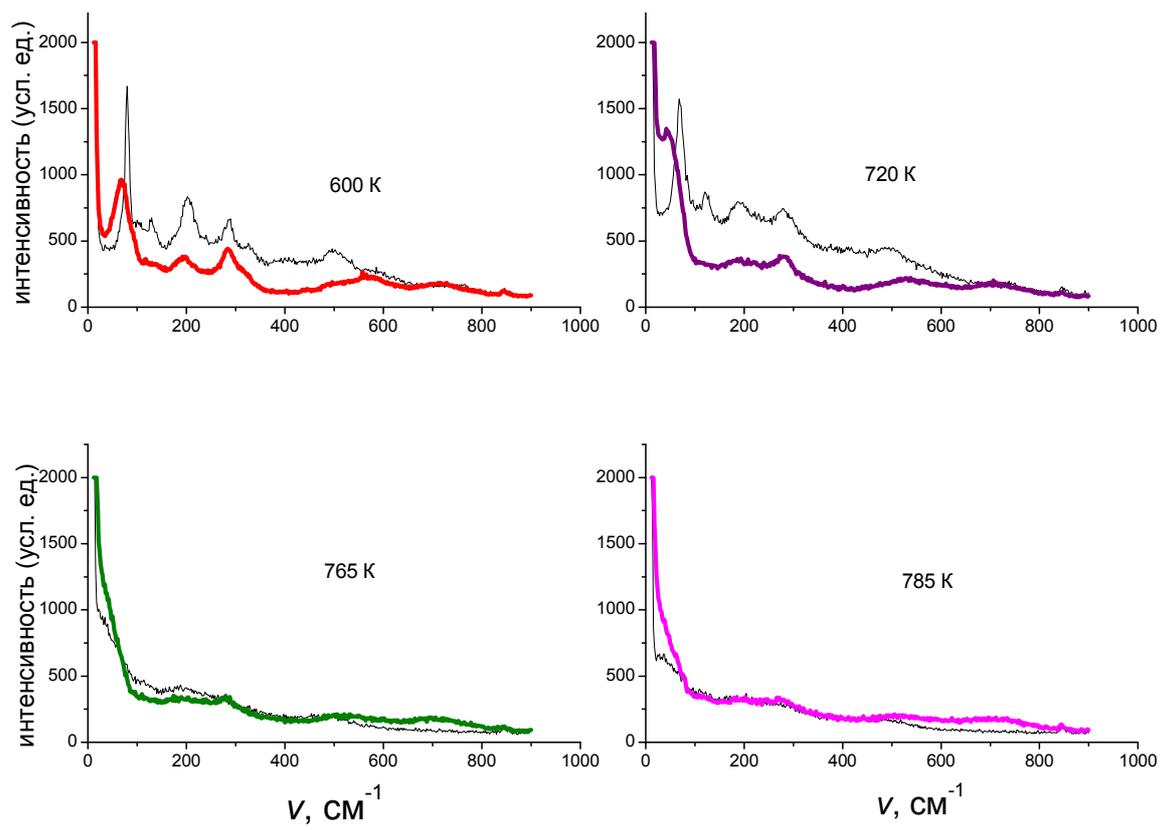


Рис. 5.14. Окончательный вид графиков

6. Корректировка спектров

В файле PTOat750K содержится спектр титаната свинца при 750 К. Импортируйте этот файл в таблицу. Колонка А – частота, колонка В – интенсивность экспериментального спектра. Истинная интенсивность линий в спектрах комбинационного рассеяния (КРС) находится по формуле:

$$I_{\text{экс}} = (n(\omega, T) + 1) I_{\text{ист}}, \quad (6.1)$$

где

$$n(\omega, T) = (e^{\hbar\omega/kT} - 1)^{-1} \quad (6.2)$$

– фактор температурной заселенности. Температура измеряется в Кельвинах. Если частота берётся в обратных сантиметрах (см^{-1}), то $\hbar/k = 1,4388$.

Проведем коррекцию спектра на температурный фактор заселенности. Для этого добавьте новую колонку С, щелкнув правой кнопкой мыши и выбрав пункт Add New Column (добавить новый столбец) (рис. 6.1).

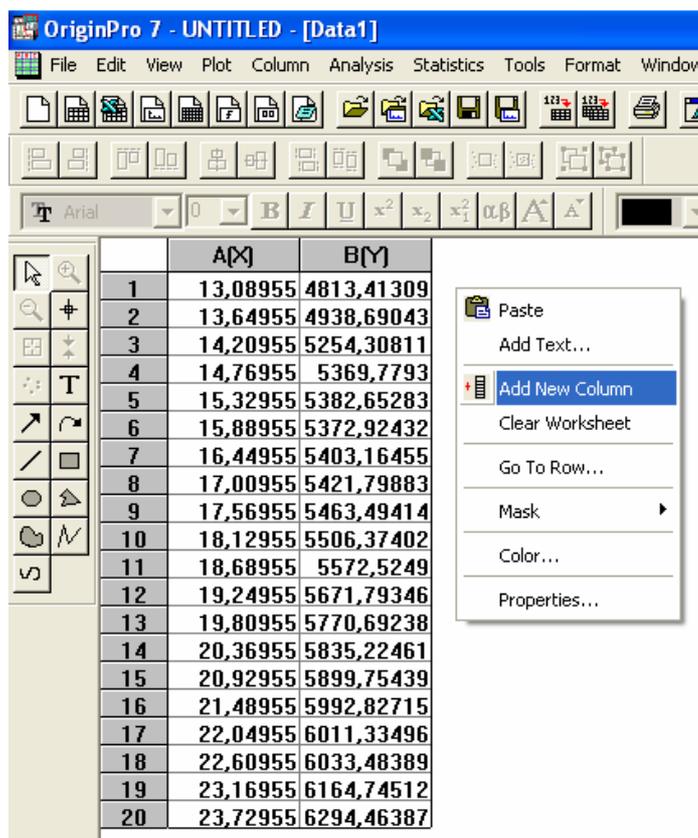


Рис. 6.1. Добавление нового столбца к таблице

В данной колонке будем записывать истинную интенсивность линий в спектрах, т. е. проведем их корректировку. Выделите колонку С и, вызвав контекстное меню, нажав правую кнопку мыши, выберите пункт **Set Column Values** (установить значение столбца). В появившемся окне (рис. 6.2) введите формулу для истинной интенсивности $I_{\text{ист}}$.

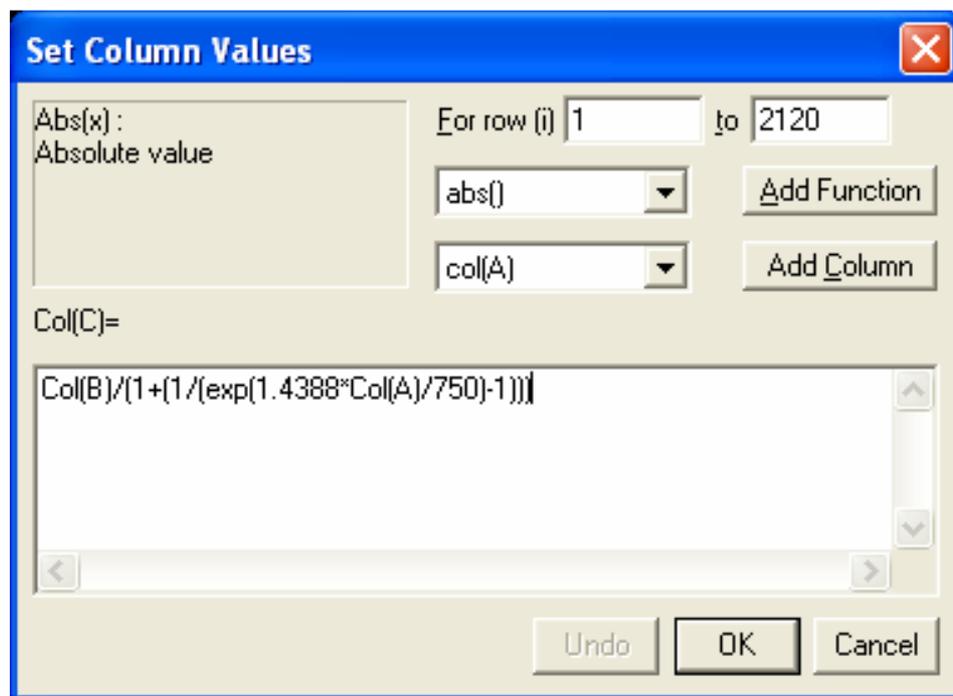


Рис. 6.2. Ввод формулы для вычисления значений в столбце таблицы

Подтвердив введенную формулу нажатием кнопки ОК, колонка С автоматически заполнится значениями истинной интенсивности. Это удобно, т.к. в таблице сохранились и экспериментальный и скорректированный спектры (таблица 6.1).

Таблица 6.1.

	A[X]	B[Y]	C[Y]
1	13,08955	4813,41309	119,3646
2	13,64955	4938,69043	127,64258
3	14,20955	5254,30811	141,29573
4	14,76955	5369,7793	150,01155
5	15,32955	5382,65283	155,98922
6	15,88955	5372,92432	161,30916
7	16,44955	5403,16455	167,84439
8	17,00955	5421,79883	174,06394
9	17,56955	5463,49414	181,08053
10	18,12955	5506,37402	188,21811
11	18,68955	5572,5249	196,25811
12	19,24955	5671,79346	205,62973
13	19,80955	5770,69238	215,18679
14	20,36955	5835,22461	223,62497
15	20,92955	5899,75439	232,18992
16	21,48955	5992,82715	242,03431
17	22,04955	6011,33496	248,97564
18	22,60955	6033,48389	256,10299
19	23,16955	6164,74512	268,01293
20	23,72955	6294,46387	280,11717

Отобразив спектры на графике, вы должны получить следующее (см. рис. 6.3):

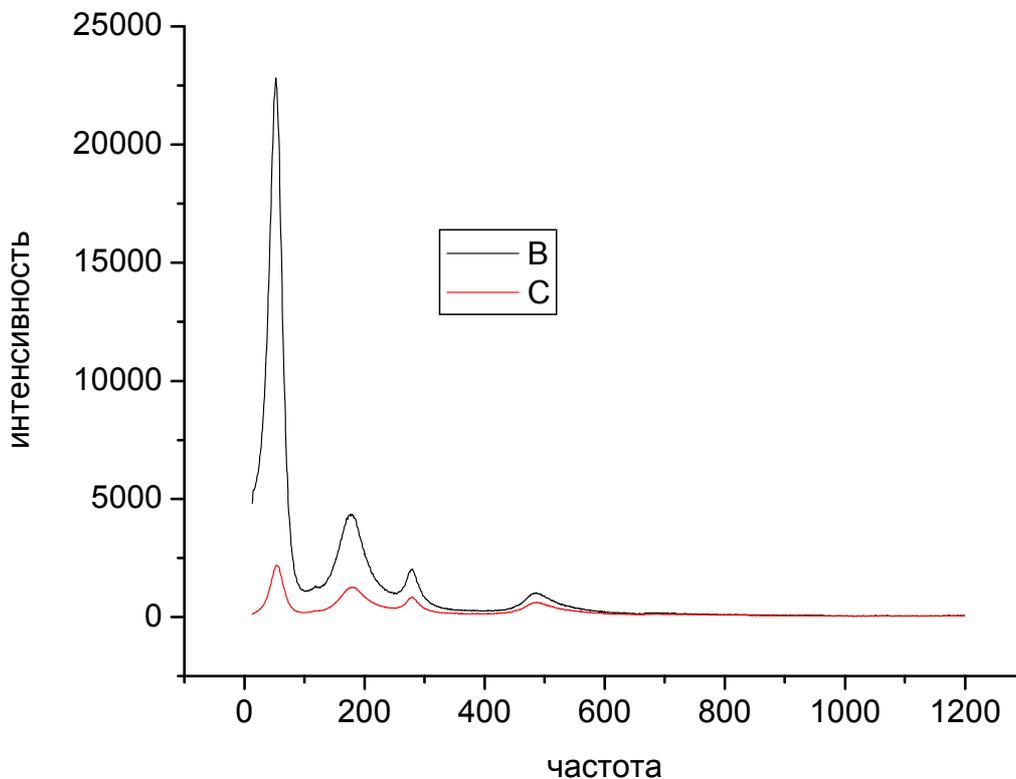


Рис. 6.3. Исходный спектр и спектр, скорректированный с учетом температурного фактора заселенности

7. Простые операции со спектрами

В этом разделе на примере данных из файла PZTRamesh мы рассмотрим возможные простые операции со спектрами. Для начала отобразите на графике спектр гетероструктуры, который содержит спектр SrRuO_3 и $\text{Pb}(\text{TiZr})\text{O}_3$ (колонка FilmSRO). Для того чтобы из спектра вычесть линейный фон, воспользуйтесь меню **Tools** (инструменты), в котором выберите пункт **Baseline** (базовая линия) (рис. 7.1). Появится окно **Baseline** (рис. 7.2).

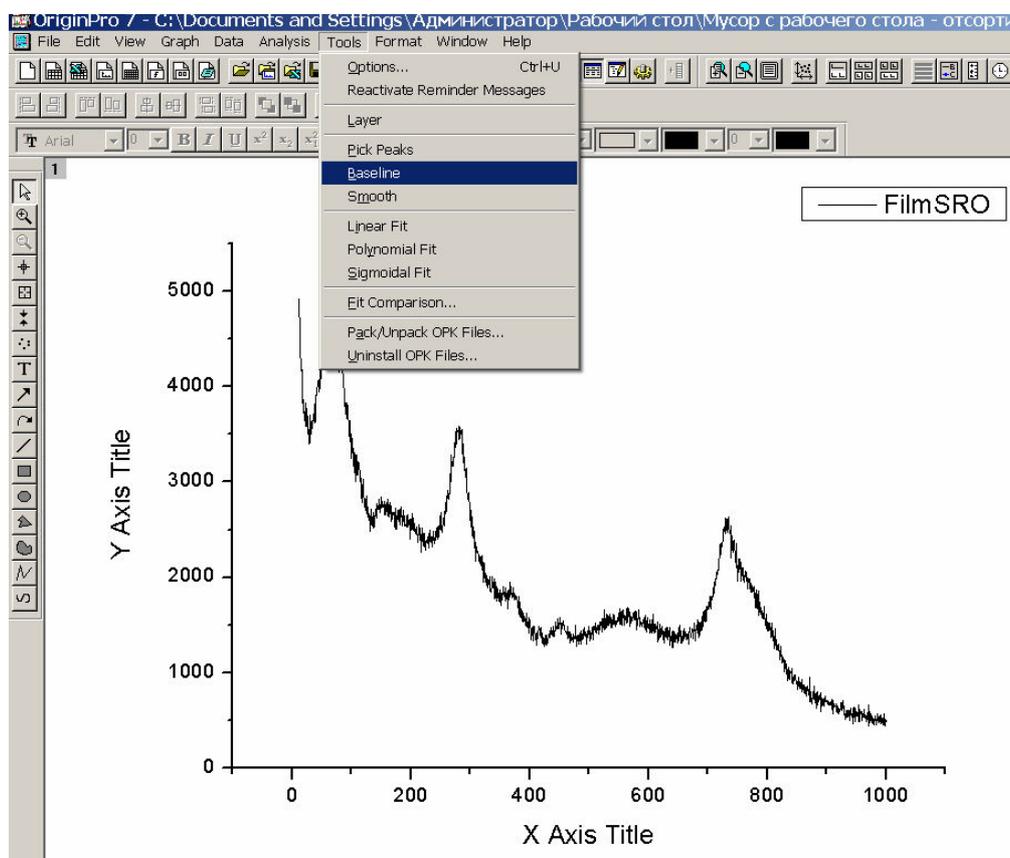


Рис. 7.1. Выбор пункта меню **Baseline**

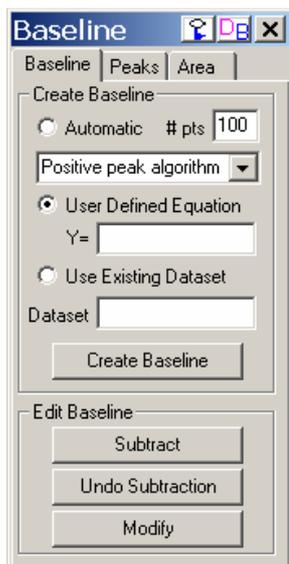


Рис. 7.2. Окно для задания параметров базовой линии

В этом окне на закладке **Baseline** в поле **Create Baseline** (создать базовую линию) в строке **User Defined Equation** (уравнение, определяемое пользователем) задайте значение фона, который будете вычитать. После этого создайте эту базовую линию, нажав на кнопку **Create Baseline** (создать базовую линию). На графике отобразится эта самая линия (рис. 7.3).

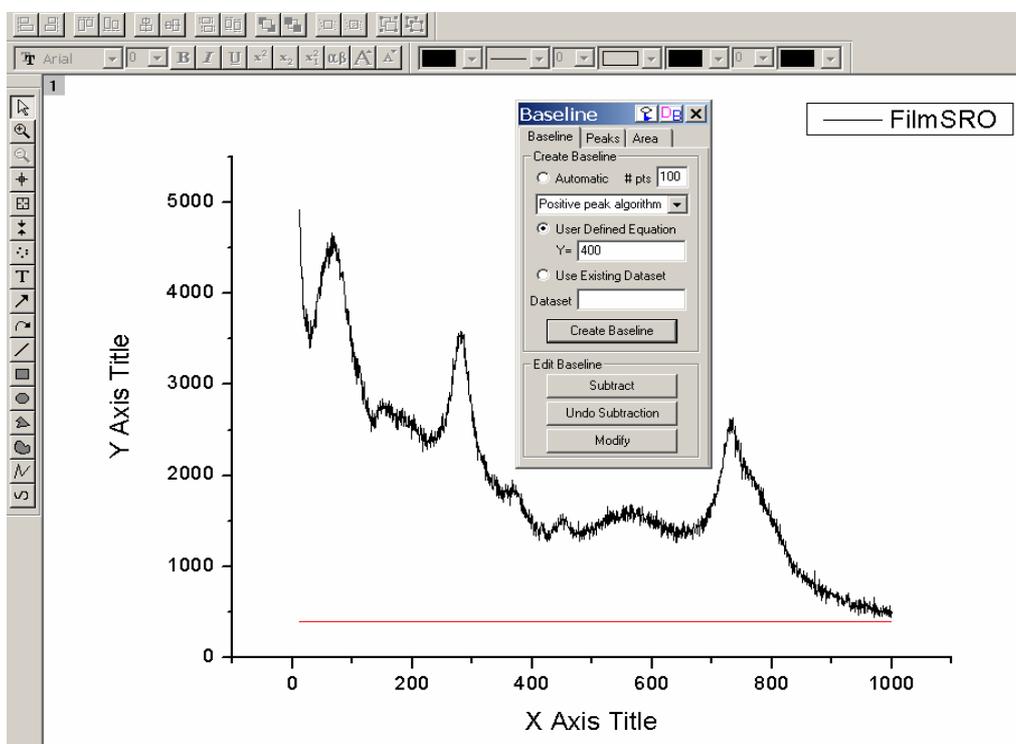


Рис. 7.3. Задание базовой линии в виде константы

Теперь, чтобы вычесть из спектра указанный вами фон, нужно нажать на кнопку **Subtract** (вычесть) (рис. 7.4), отобразится результат вычи-

тания (обратите внимание на то, что график целиком опустился вниз на 400 единиц).

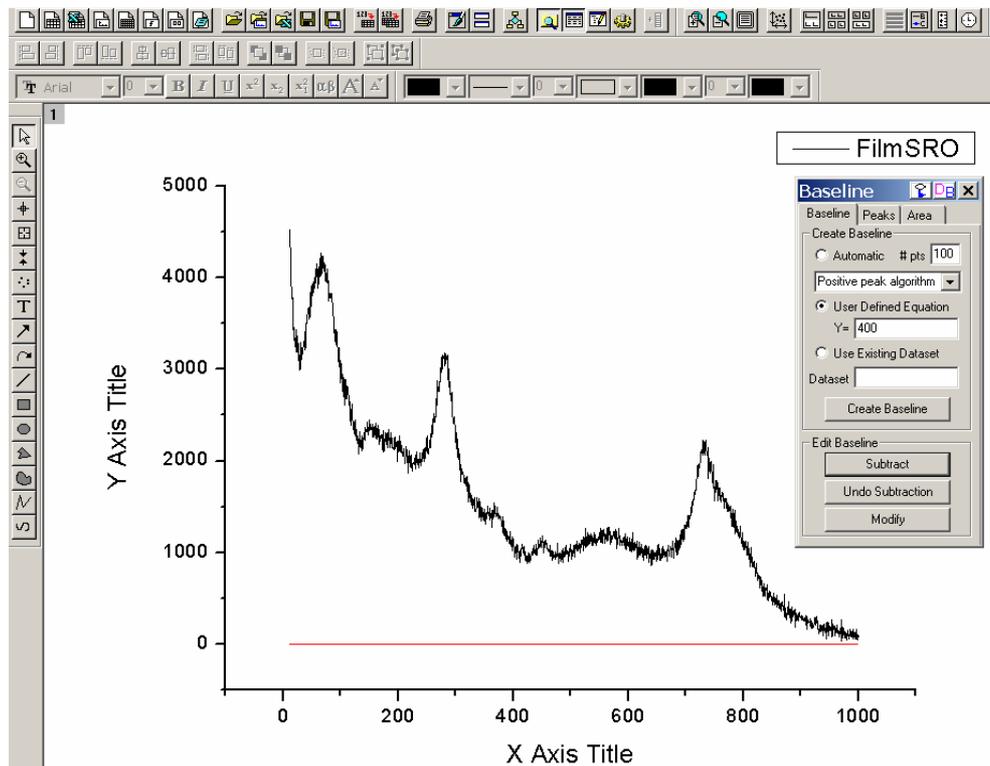


Рис. 7.4. Результат вычитания из спектра постоянного фона

Для того чтобы вычесть линейный наклонный фон из исходного спектра, нужно в строке **User Defined Equation** задать значение функции. Например, если ввести функцию $2900 - 4 \cdot X$, то после нажатия на кнопку **Create Baseline** базовая линия будет выглядеть следующим образом (см. рис. 7.5).

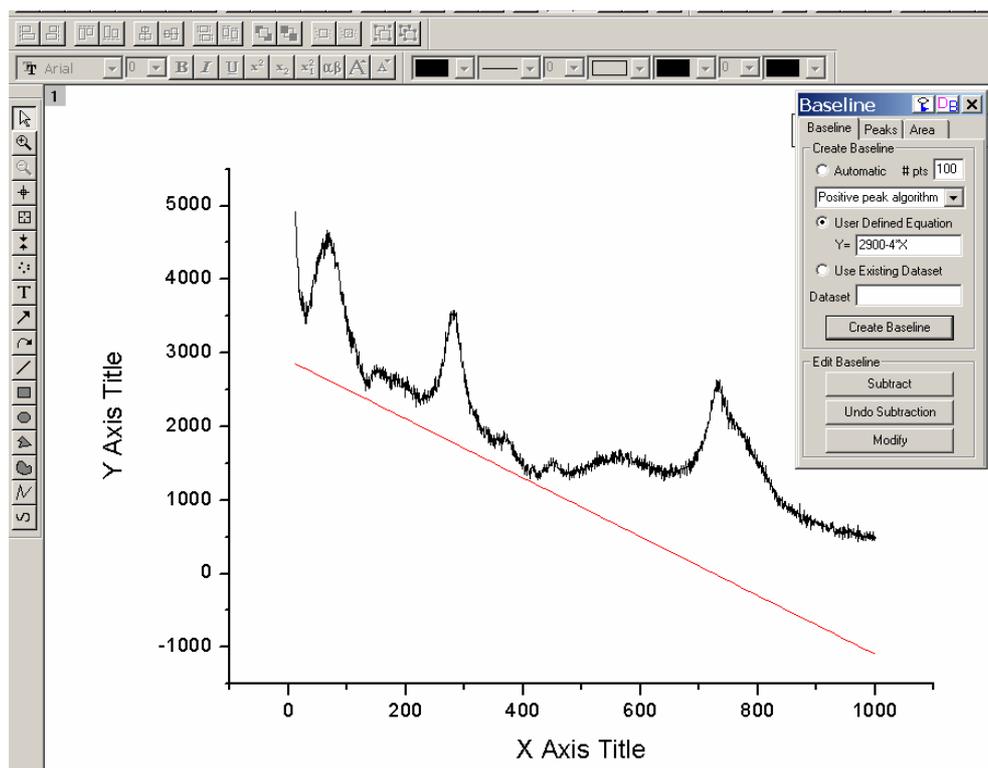


Рис. 7.5. Задание базовой линии в виде линейной функции

Результат вычитания представлен на рис. 7.6.

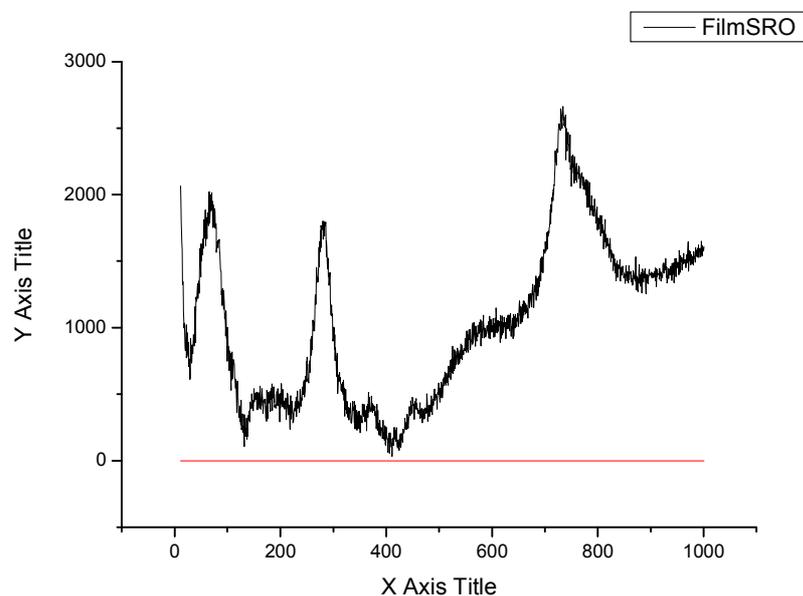


Рис. 7.6. Результат вычитания из спектра линейного фона

Также из спектра можно вычитать и нелинейный фон. Прделав аналогичные действия, задайте нелинейную функцию, например,

$$1/(0,00022 + X \cdot 0,0000007) - 800.$$

Вид базовой линии представлен на рис. 7.7., а результат вычитания - на рис. 7.8.

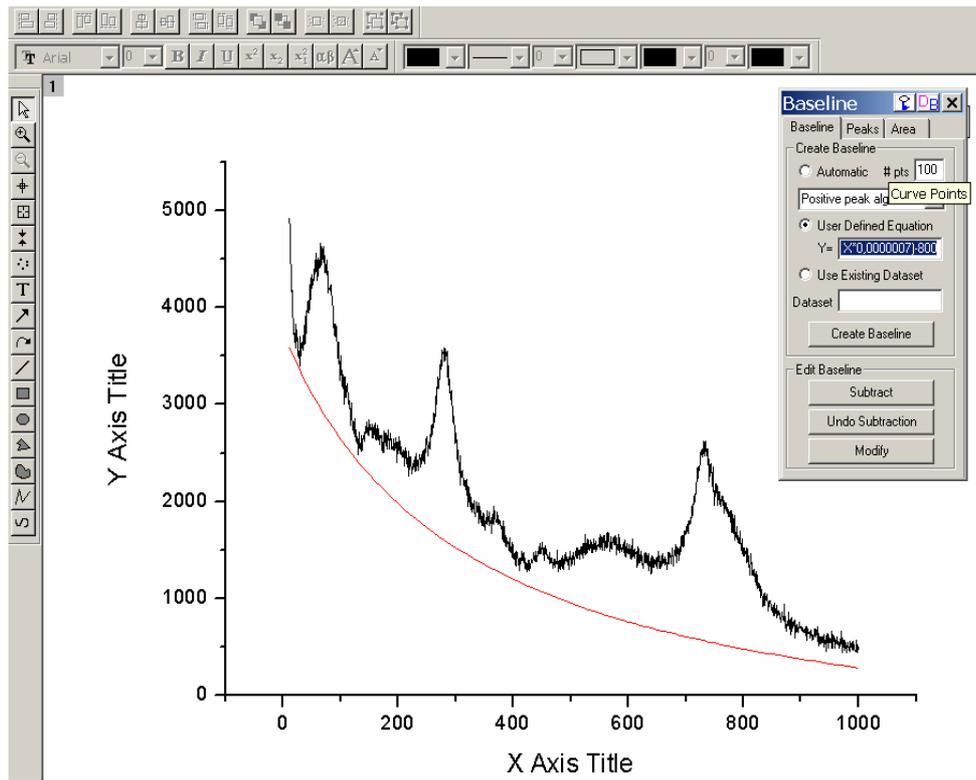


Рис. 7.7. Задание базовой линии в виде нелинейной функции

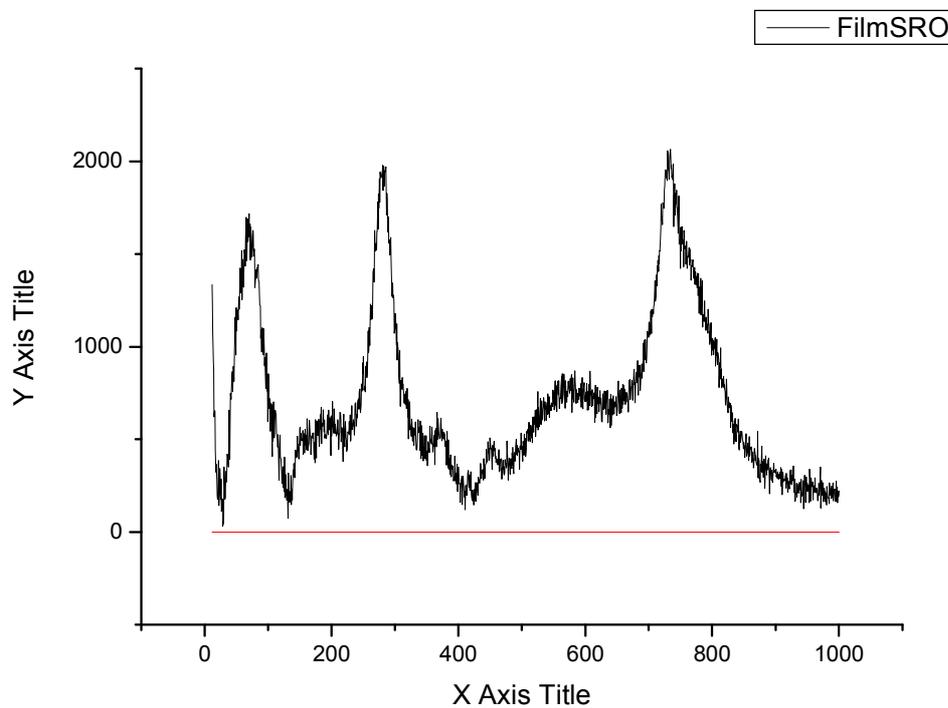


Рис. 7.8. Результат вычитания из спектра нелинейного фона

Обратите внимание, что при вычитании фона изменяется не только график, но и исходная таблица данных!

Вычесть из спектра линейный фон можно и другим способом, воспользовавшись меню **Analysis/ Subtract/ Straight Line** (анализ/ вычитание/ прямая линия) (рис.7.9).

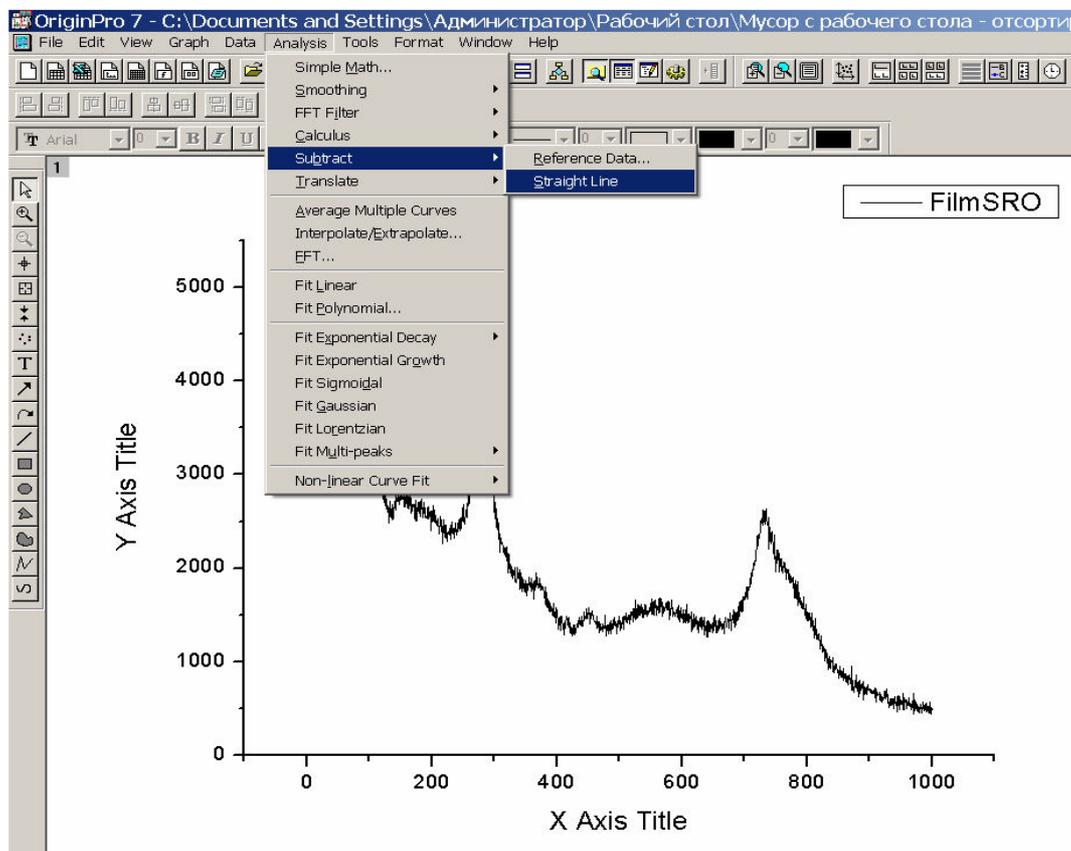


Рис. 7.9. Выбор пункта меню **Analysis/ Subtract/ Straight Line**

После выбора данной опции курсор приобретет вид крестика (рис. 7.10), с помощью которого вы задаете начало и конец прямой линии, нажимая клавишу **Enter**. Линия появится на очень короткий промежуток времени, и автоматически отобразится результат вычитания линейного фона (рис.7.11).

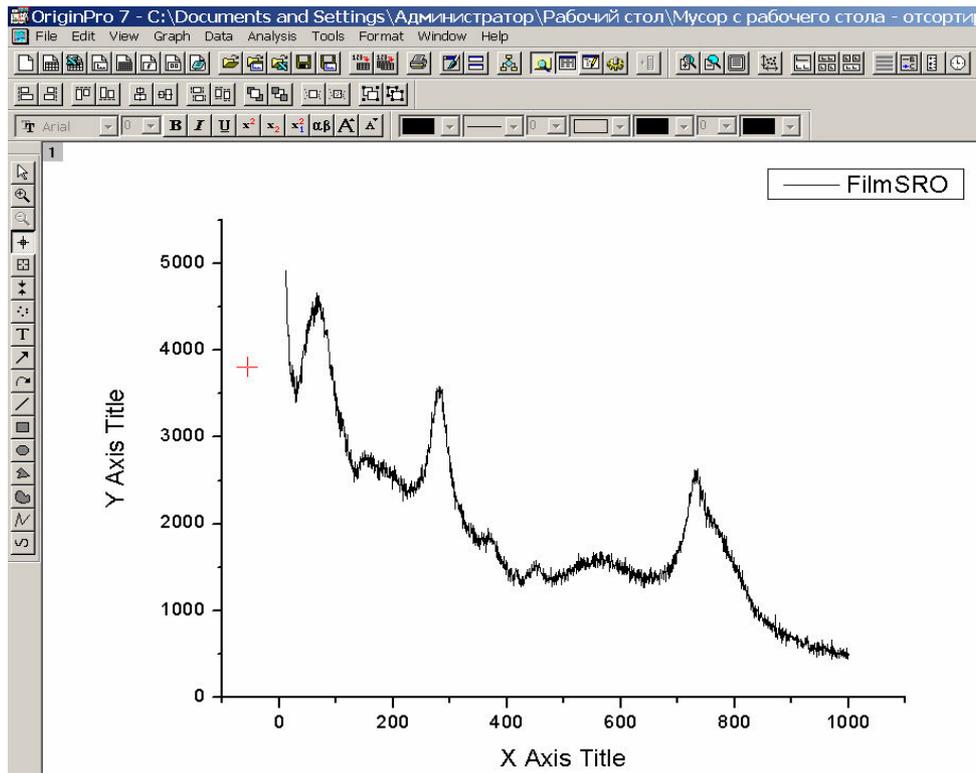


Рис. 7.10. Результат вычитания из спектра линейного фона

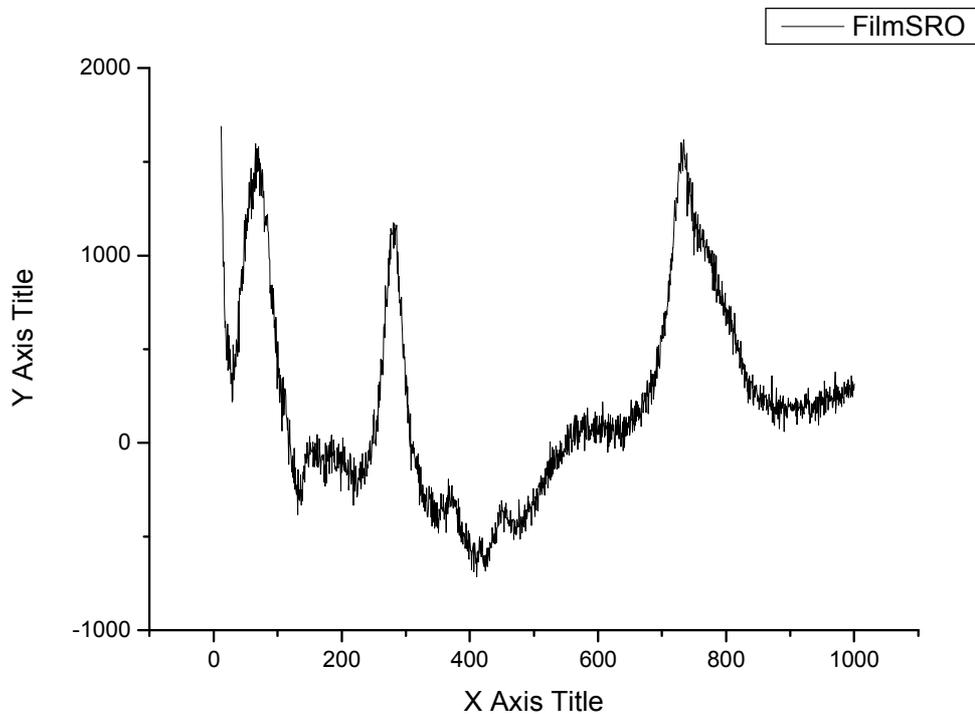


Рис. 7.11. Результат вычитания линейного фона с использованием меню Analysis/ Subtract/ Straight Line

Помимо вычитания фонов, можно вычитать спектры друг из друга. В качестве примера рассмотрим тот же файл PZTRamesh. Отобразите на графике спектр SrRuO₃ (колонка SRO) и спектр гетероструктуры, содержащий спектр SrRuO₃ и Pb(TiZr)O₃ (колонка FilmSRO). Воспользуйтесь меню Analysis/ Subtract/ Reference Data (анализ/ вычитание/ ссылка на данные) (рис. 7.12).

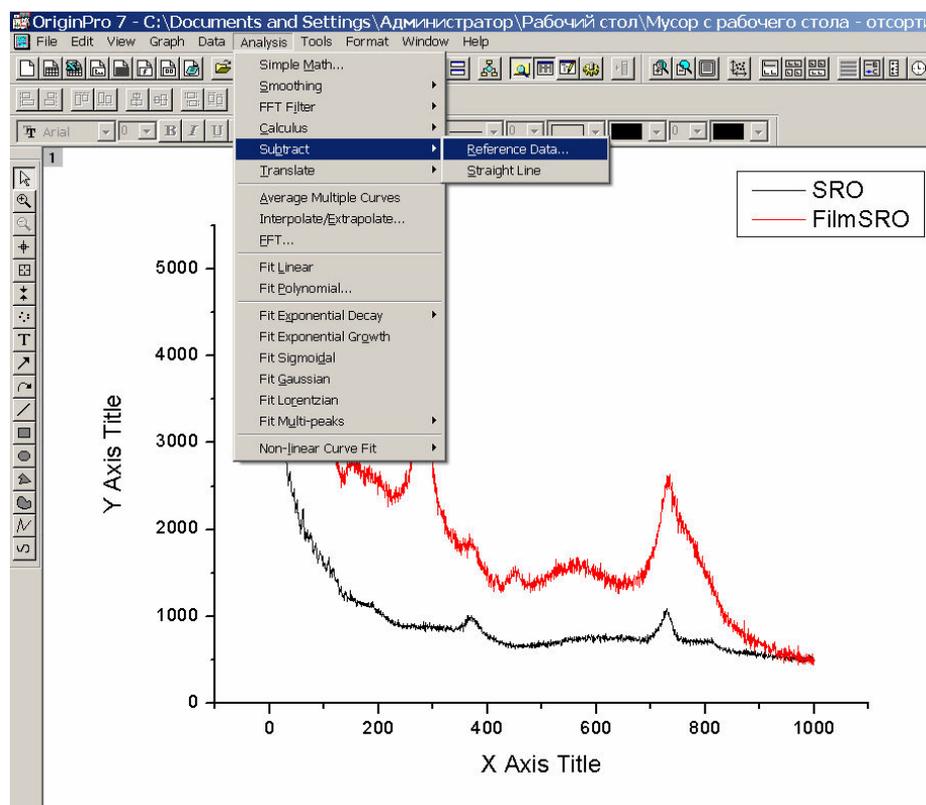


Рис. 7.12. Выбор пункта меню Analysis/ Subtract/ Reference Data

У вас должно появиться диалоговое окно **Math on/ between Data Set** (математические действия с наборами данных) (рис. 7.13), в котором в списке **Available Data** (доступные данные) выберите и переместите желаемые наборы данных в поля Y1 и Y2, используя кнопку **=>**. Укажите в окошке **operator** (операция) необходимое математическое действие из представленных в списке (+, -, *, /, ^) После нажатия на кнопку **ОК** на графике отобразится результат вычитания и вычитаемый график (рис. 7.14).

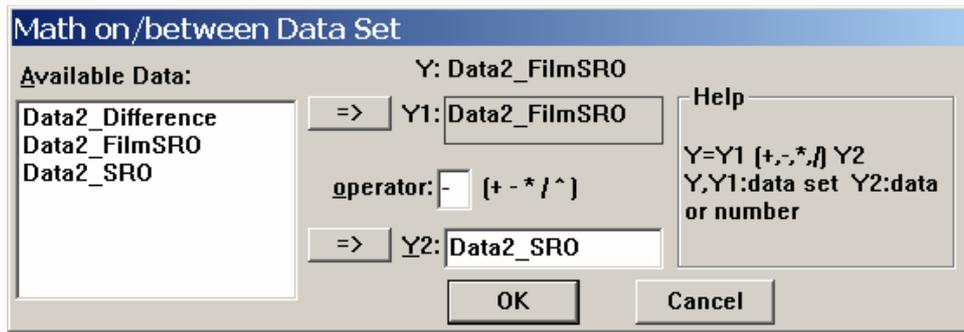


Рис. 7.13. Окно математических действий со спектрами

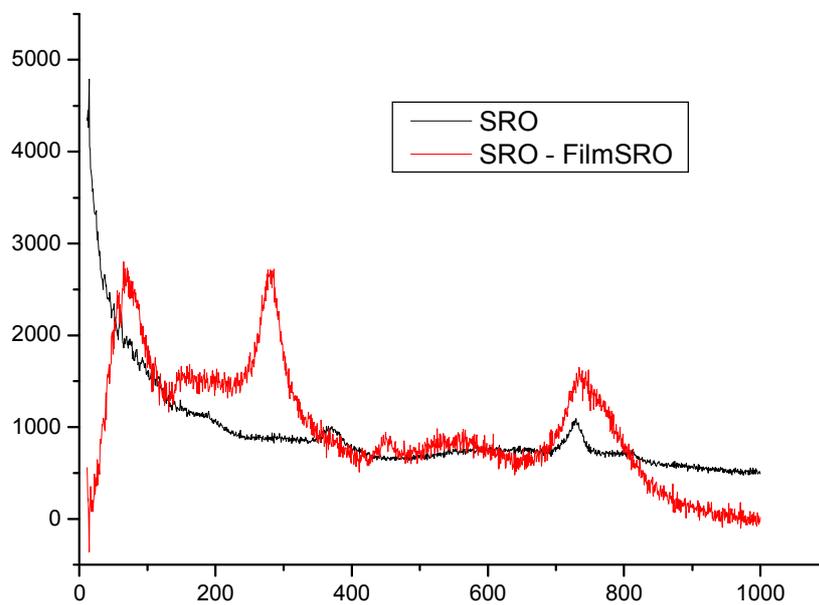


Рис. 7.14. Результат вычитания спектров

8. Сглаживание спектров

Дан спектр гетероструктуры: на подложку SrTiO_3 нанесена пленка SrRuO_3 , которая является проводящим электродом и полностью экранирует спектр подложки. На электрод нанесена пленка сегнетоэлектрика $\text{Pb}(\text{TiZr})\text{O}_3$ толщиной 150 нм (файл PZTRamesh).

В колонке A представлены значения частоты, колонка SRO соответствует спектру SrRuO_3 на аналогичной подложке, но ещё до нанесения пленки $\text{Pb}(\text{TiZr})\text{O}_3$, в колонке film+SRO представлен спектр гетероструктуры, который содержит спектр SrRuO_3 и $\text{Pb}(\text{TiZr})\text{O}_3$. Колонка Difference – это разность между спектрами – из спектра гетероструктуры вычитаем спектр электрода и получаем спектр только $\text{Pb}(\text{TiZr})\text{O}_3$. Спектр Difference действительно очень близок к спектру $\text{Pb}(\text{TiZr})\text{O}_3$. Полученные графики представлены на рис. 8.1.

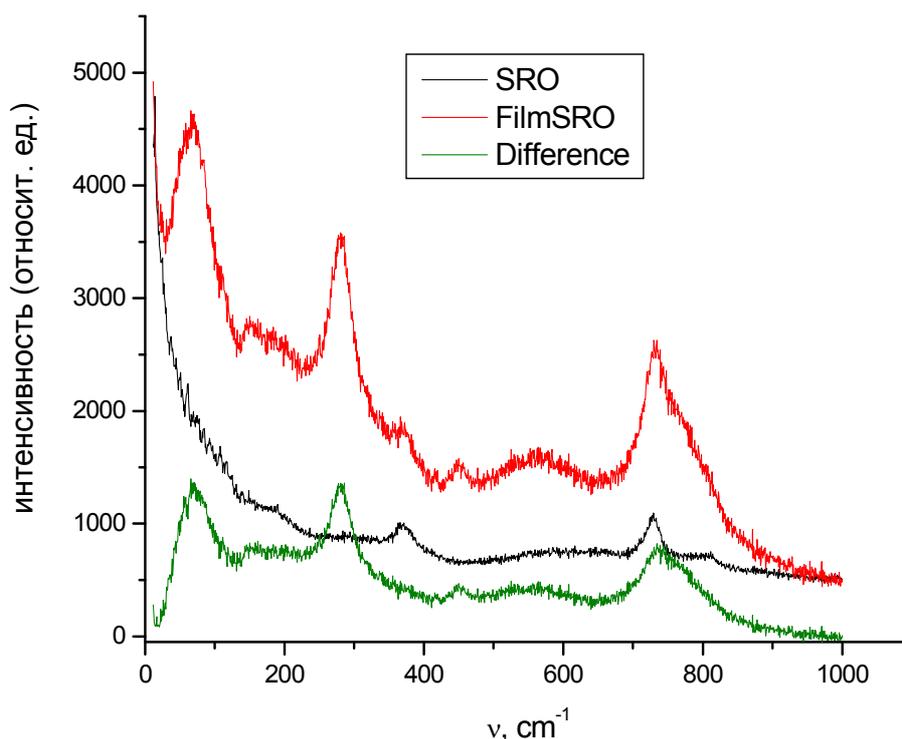


Рис. 8.1. Спектры с заметным тепловым шумом

Можно провести сглаживание, т.е. устранение теплового шума. Для этого воспользуйтесь на панели инструментов меню **Analysis** (анализ) и в выпадающем списке выберите **Smoothing/ FFT Filter** (сглаживание/ фильтрация Фурье) (рис. 8.2).

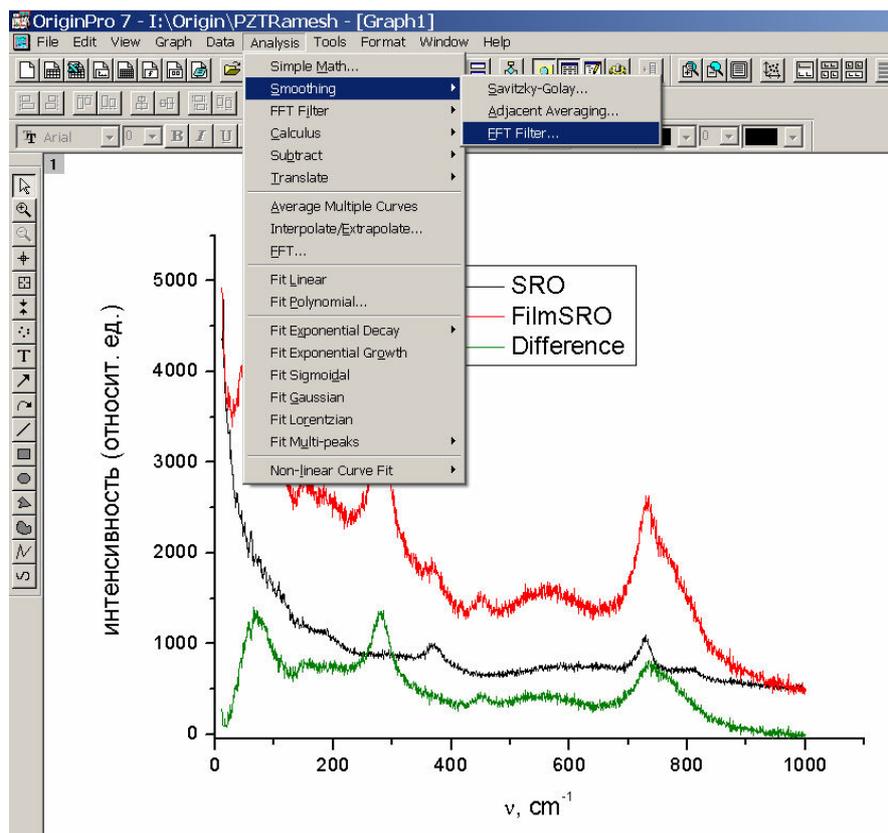


Рис. 8.2. Выбор способа сглаживания данных

Должно появиться окно **Smoothing** (рис. 8.3), в котором в списке **Enter Number of Points** (введите количество точек) пакет Origin по умолчанию предполагает число точек 5. Определить оптимальное число точек для сглаживания можно только опытным путем. Если график получается слишком «лохматым», то число точек надо увеличить. Если на графике исчезают некоторые важные детали, то число точек надо уменьшить. В списке **Smoothed Line Color** (цвет сглаживающей линии) выберите цвет кривой, нажмите **Apply** (применить) и **OK**.

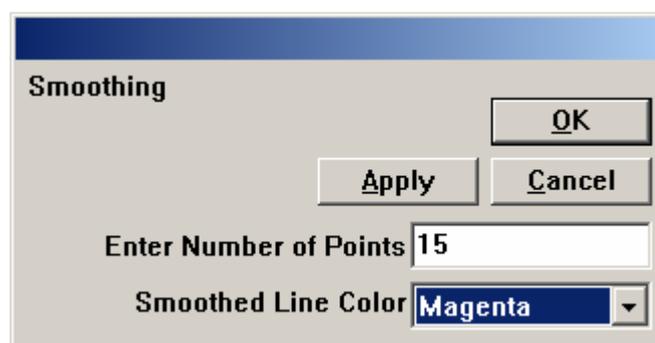


Рис. 8.3. Параметры сглаживания

По умолчанию пакет Origin проводит сглаживание для колонки SRO, т. е. для первого набора данных, соответствующих спектру SrRuO₃ (рис. 8.4).

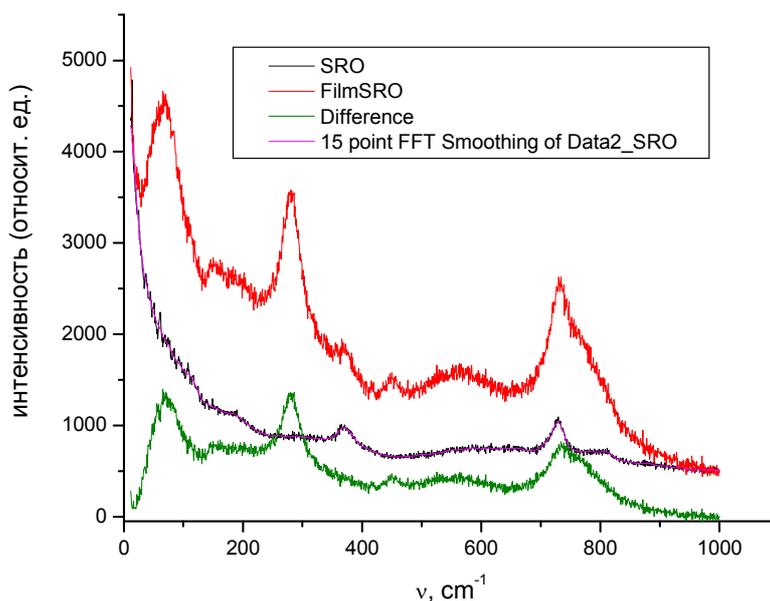


Рис. 8.4. Результаты сглаживания

Для выбора других наборов данных щелкните правой кнопкой на иконке слоя (серый квадратик в верхнем левом углу), и в предлагаемом списке отметьте галочкой необходимые вам данные (рис. 8.5).

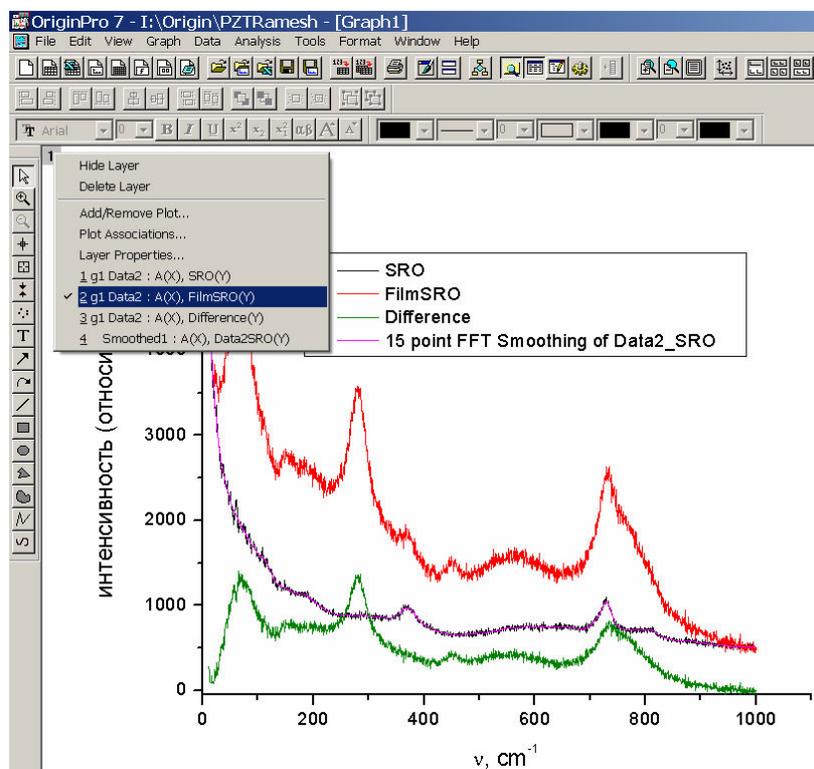


Рис. 8.5. Выбор набора данных для сглаживания

Сглаживание можно провести и другим способом: в меню **Analysis/Smoothing** (анализ/ сглаживание) воспользуйтесь функцией **Adjacent Averaging** (усреднение по нескольким точкам). Появится такое же окно (рис. 8.3), как и при использовании **FFT Filter** (фильтрация Фурье). Выполнив необходимые действия, вы получите результат, похожий на результат, представленный на рис. 8.6. Отличие состоит в том, что в легенде отображается та опция, которую вы использовали для сглаживания: для фильтрации Фурье – аббревиатура **FFT**, для усреднения по нескольким смежным точкам – **AA** (рис. 8.7).

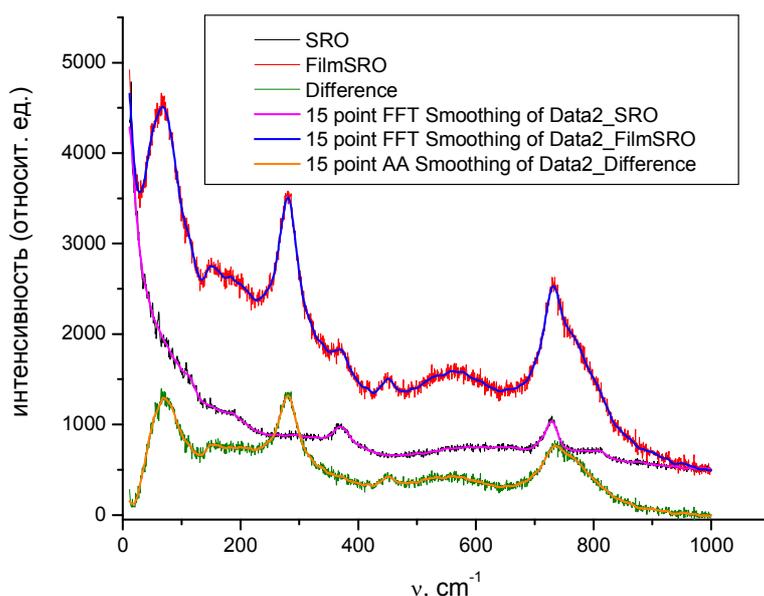


Рис. 8.6. Результат сглаживания всех спектров методом Фурье-фильтрации

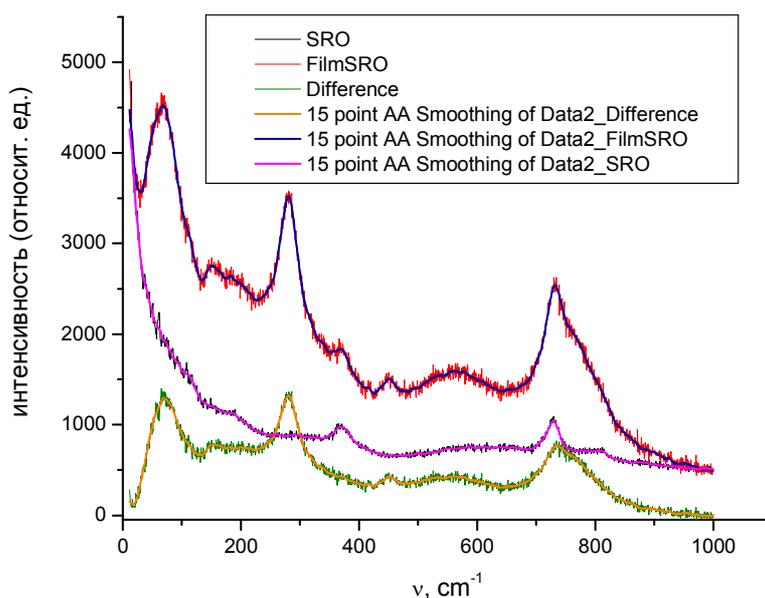


Рис. 8.7. Результат сглаживания всех спектров методом усреднения

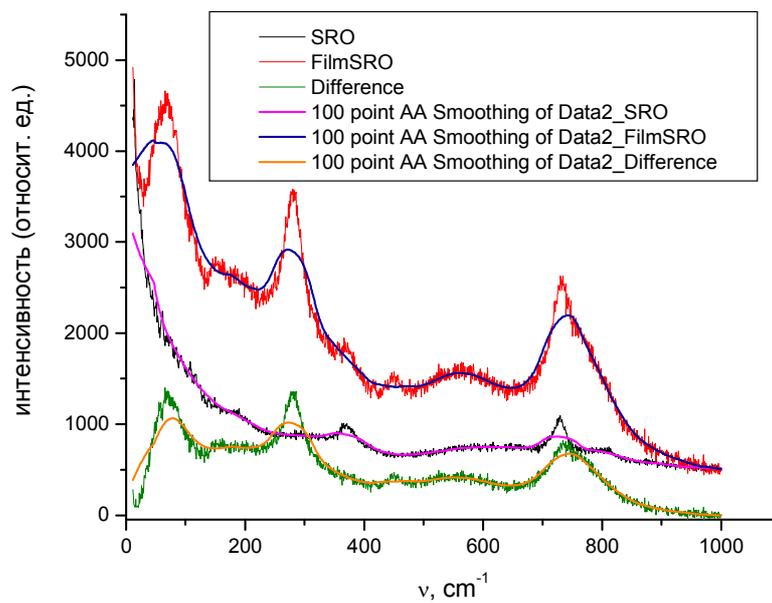


Рис. 8.8. Пример неправильного выбора количества точек для усреднения: потеряны важные детали спектра

9. Аппроксимация спектров лоренцианами

В файле D16fig3rus приведены экспериментальные значения спектра, которые мы будем использовать для демонстрации возможности пакета Origin аппроксимировать спектр набором лоренцианов

$$y = y_0 + \frac{2A}{\pi} \frac{w}{4(x - x_c)^2 + w^2},$$

где A – интегральная интенсивность пика, x_c – частота максимума, w – полуширина, y_0 – смещение.

Для начала необходимо произвести корректировку спектра на температурный фактор. Добавив к таблице новую колонку и выделив ее, в окне Set Column Values (установить значение столбца) введите формулу (6.1), после чего в новой колонке появятся значения скорректированного спектра. Отобразите полученный спектр на графике в виде Line (линия). Теперь в меню Analysis (анализ) выберите пункт Fit Multi-peaks/ Lorentzian (аппроксимация функцией с несколькими максимумами / лоренциан) (рис. 9.1).

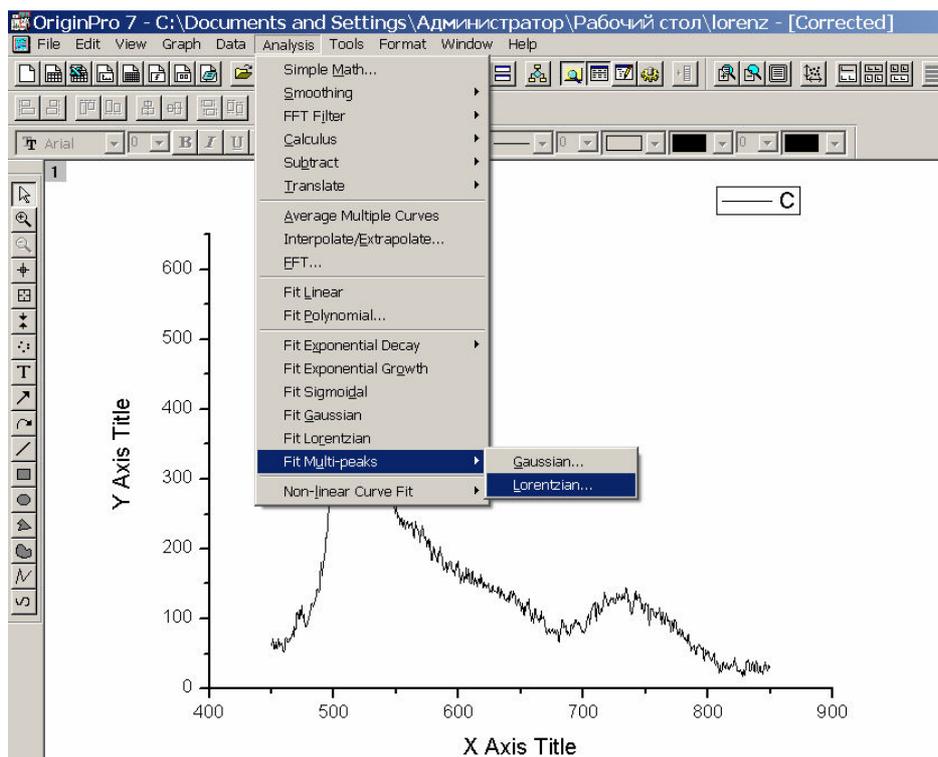


Рис. 9.1. Выбор режима аппроксимации функцией Лоренца

На экране появится окно, в котором в списке Number of Peaks вам нужно будет указать количество пиков – 6 и подтвердить это количество нажатием кнопки ОК (рис. 9.2).



Рис. 9.2. Ввод числа пиков

В сменившемся окне в списке **Initial half width estimate** (начальная оценка полуширины) по умолчанию будет предложено значение полуширины кривой, которое нужно также подтвердить нажатием кнопки **OK** (рис. 9.3).

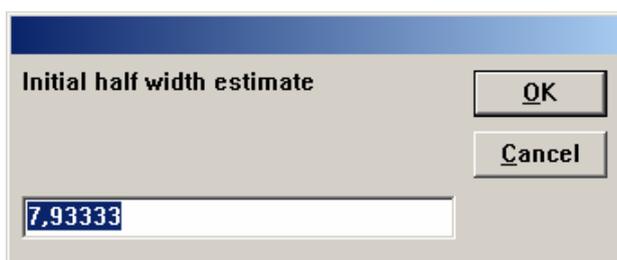


Рис. 9.3. Ввод начальной оценки полуширины пика

Затем курсором в виде крестика отметить все эти пики на спектре. Фиксация положения максимума происходит при нажатии на клавишу **Enter** (рис. 9.4).

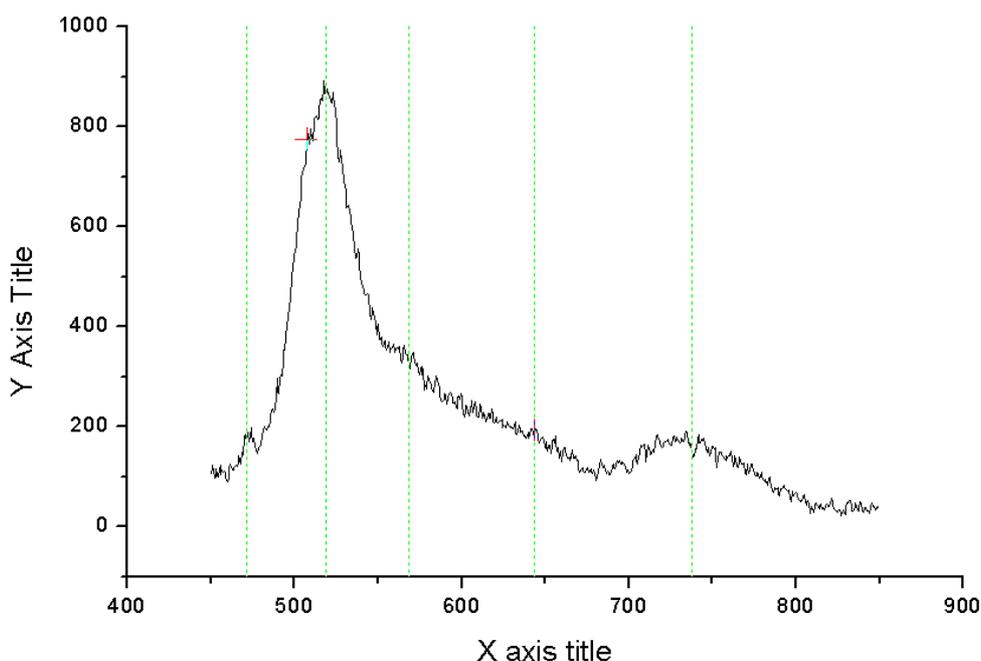


Рис. 9.4. Графический ввод положения максимумов на графике спектра

После указания последнего пика на графике отобразится аппроксимирующая линия и 6 лоренцианов, которые использовались для подгонки спектра (рис. 9.5). В протоколе результатов Results Log будут записаны все значения параметров пиков.

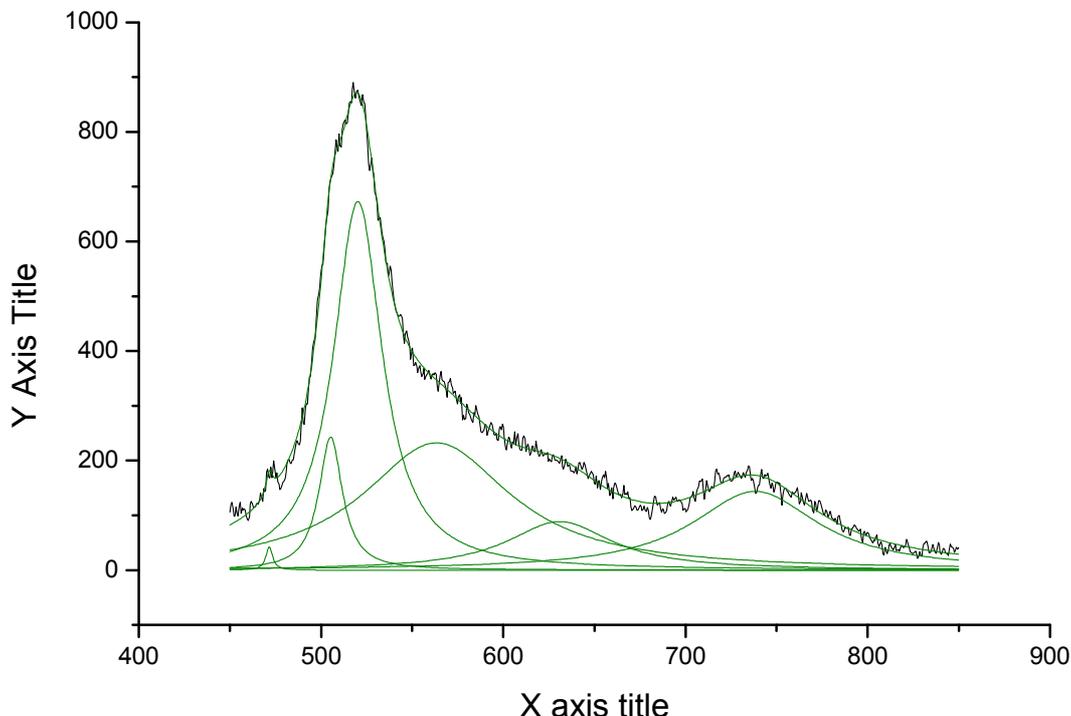


Рис. 9.5. Результат аппроксимации спектра набором лоренцианов

Lorentz(6) fit to Data1_C:

Chi²/DoF 74,23194

R² 0,99503

Peak	Area	Center	Width	Height
1	15495	739,06	88,554	111,40
2	22049	520,57	32,641	430,05
3	3797,9	505,50	15,791	153,11
4	156,56	471,62	4,2640	23,375
5	20069	564,22	86,666	147,42
6	8930,4	628,71	76,767	74,059

Параметр имеют смысл: area (A) – интегральная интенсивность пика, center (x_c) – частота максимума, width (w) – полуширина, height ($\frac{2A}{\pi w}$) – амплитуда.

Аппроксимацию спектра лоренцианами можно провести и с помощью мастера аппроксимаций NLSF Wizard, который вызывается из пункта меню Analysis/Non-linear Curve Fit/Fitting Wizard. На этапе выбора данных Select Data среди предложенных данных в качестве зависимой переменной в списке Dependent Variable можно выбрать нужный набор данных вручную, предварительно установив флажок в пункт Select Dataset Manually. Независимая переменная (Indep. Var.) устанавливается по умолчанию. В этом же окне в списке Independent Variable Range (диапазон независимой переменной) вы можете указать значения диапазона, для которого будет проводиться аппроксимация, а также в списке Data Display Options поменять параметры отображаемых данных (рис. 9.6). Переход к следующему этапу осуществляется нажатием кнопки Next (далее).

На этапе выбора функции Select Function вам предлагается множество различных категорий Category, среди которых выберите

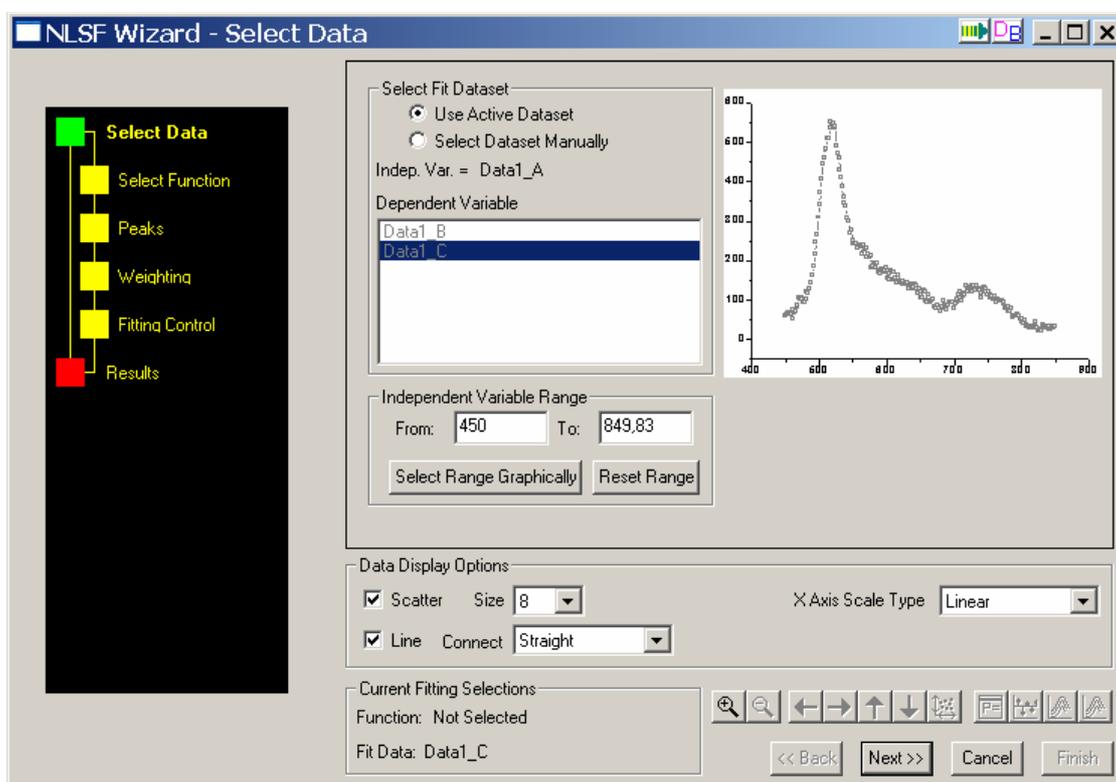


Рис. 9.6. Выбор набора данных

Spectroscopy (спектроскопия), при этом в списке функций Function автоматически отображаются все функции, относящиеся к данной категории. Выберите функцию Lorentz. В окне Preview (просмотр) представлены формула и внешний вид данной функции (рис. 9.7).

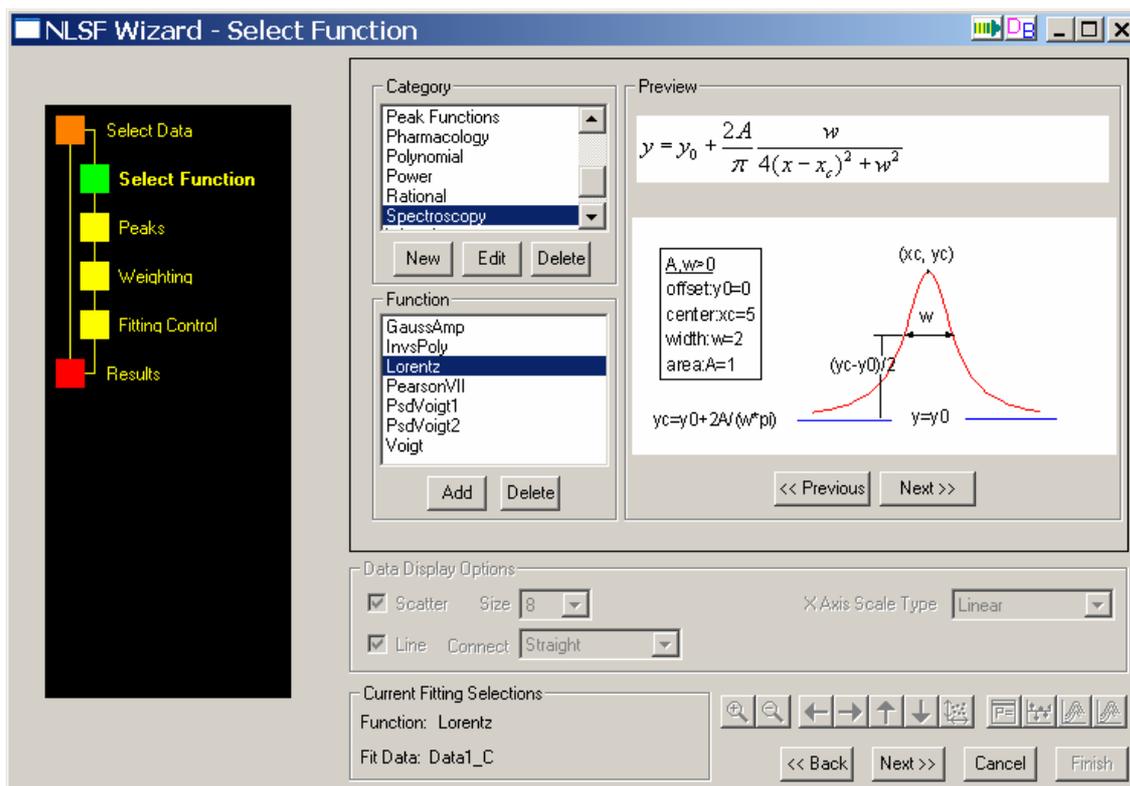


Рис. 9.7. Выбор аппроксимирующей функции

На шаге **Peaks** (пики) установите флажок в списке **Multiple Peaks**, укажите число пиков, после этого нажмите на кнопку **Pick Peaks** и отметьте их на графике с помощью курсора в виде крестика, нажимая **Enter**. У вас появятся вертикальные прямые, проходящие через пики (рис. 9.8).

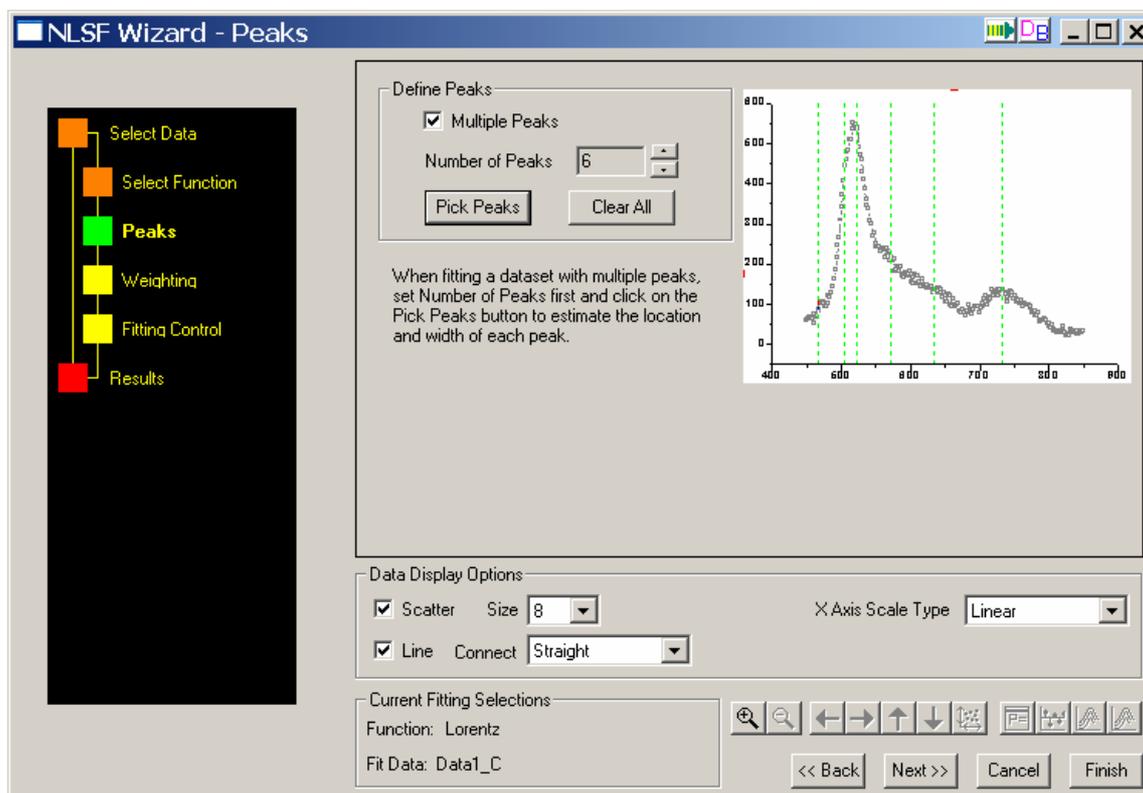


Рис. 9.8. Указание положения пиков на графике

После нажатия на кнопку **Next** (далее) мастер аппроксимаций переходит к следующему этапу и предлагает учесть веса данных (рис. 9.9). Мы выберем вариант **None** (без учета весов), предлагаемый по умолчанию.

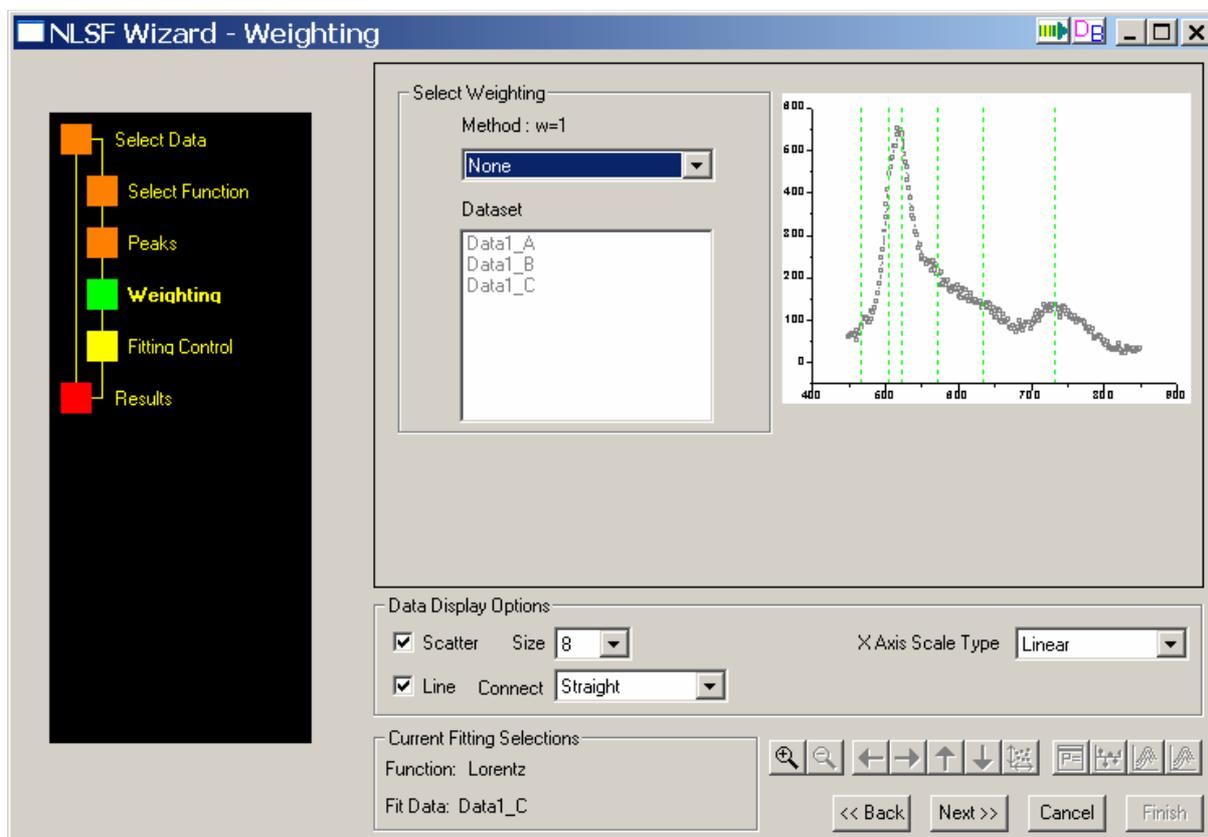


Рис. 9.9. Выбор способа учета весов экспериментальных данных

После нажатия на кнопку **Next** (далее) происходит переход к следующему этапу **Fitting Control** (управление аппроксимацией), на котором проводится аппроксимирующая линия, и если аппроксимация прошла не очень хорошо, то придется самим ввести кое-какие параметры, щелкнув по кнопке **Parameter Display** в правом нижнем углу (рис. 9.10). Появится окно **Parameter** (параметры) (рис. 9.11), в котором, скорее всего, придется менять значения x_{s_i} и w_i . В колонке **Fixed** нужно поставить галочки напротив параметров, которые можно зафиксировать, затем руками набрать предполагаемые значения x_{s_i} и w_i .

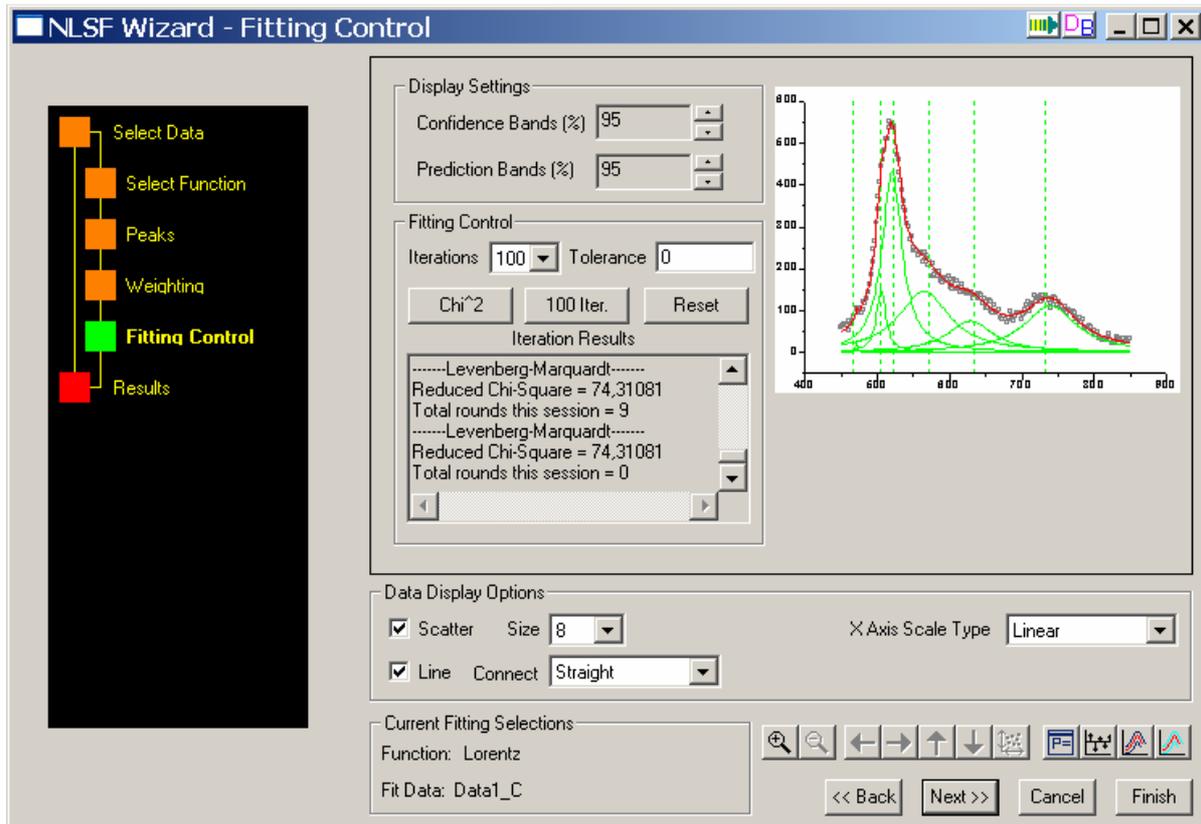


Рис. 9.10 Управление аппроксимацией

The screenshot shows a software window titled "Parameter" with a blue header bar. On the left side, there are four buttons: "Chi Sqr", "1 Iter.", "100 Iter.", and "100 Simplex Iter.". On the right side, there are buttons for "Constraints...", "Refresh", "Print", and "OK". The central area contains a text box with the following text:

```

.....
Levenberg-Marquardt
Successfully progressed 9 rounds.
Reduced Chi-sqr = 74.31081
.....
Levenberg-Marquardt
Chi-sqr is not reduced.
Reduced Chi-sqr = 74.31081
.....
    
```

Below the text box is a table with four columns: "Name", "Value", "Error", and "Fixed". The table contains 13 rows of data, with the row for "w6" highlighted in blue.

Name	Value	Error	Fixed
y0	0.72144	2.05996	<input type="checkbox"/>
xc1	471.62365	0.43456	<input type="checkbox"/>
w1	3.9768	1.41329	<input type="checkbox"/>
A1	147.82461	42.86314	<input type="checkbox"/>
xc2	505.47483	0.29278	<input type="checkbox"/>
w2	15.64938	1.43251	<input type="checkbox"/>
A2	3723.22731	706.14995	<input type="checkbox"/>
xc3	520.54307	0.37817	<input type="checkbox"/>
w3	32.77655	1.45134	<input type="checkbox"/>
A3	22243.06688	1834.30703	<input type="checkbox"/>
xc4	564.34632	1.50543	<input type="checkbox"/>
w4	85.58975	8.20865	<input type="checkbox"/>
A4	19634.54968	3052.64865	<input type="checkbox"/>
xc5	628.55776	1.8424	<input type="checkbox"/>
w5	77.1368	6.52824	<input type="checkbox"/>
A5	9038.45584	1456.61621	<input type="checkbox"/>
xc6	738.99776	0.57655	<input type="checkbox"/>
w6	87.84906	2.96632	<input checked="" type="checkbox"/>
A6	15307.07582	676.94635	<input type="checkbox"/>

Рис. 9.11. Параметры аппроксимации

После того, как вы подберете параметры, нажмите кнопку 100 Iter. (100 итераций), аппроксимирующая линия «ляжет» на исходный спектр. Теперь можно переходить к завершающему этапу **Results** (результаты) (рис. 9.12), где после нажатия кнопки **Finish** (готово) на графике отобразятся аппроксимирующая линия с 6-ю лоренцианами.

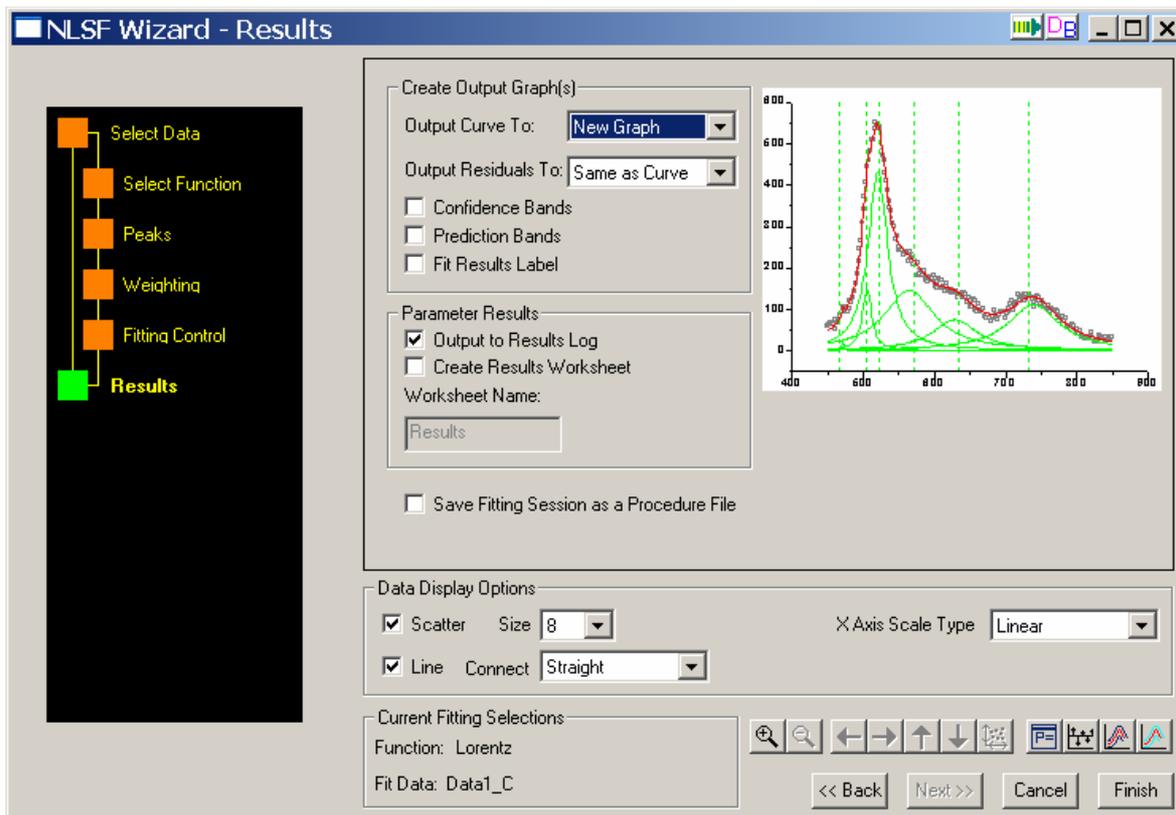


Рис. 9.12. Результат аппроксимации

Под основным графиком появится график, демонстрирующий отклонение экспериментальных данных от аппроксимирующей кривой (рис. 9.13).

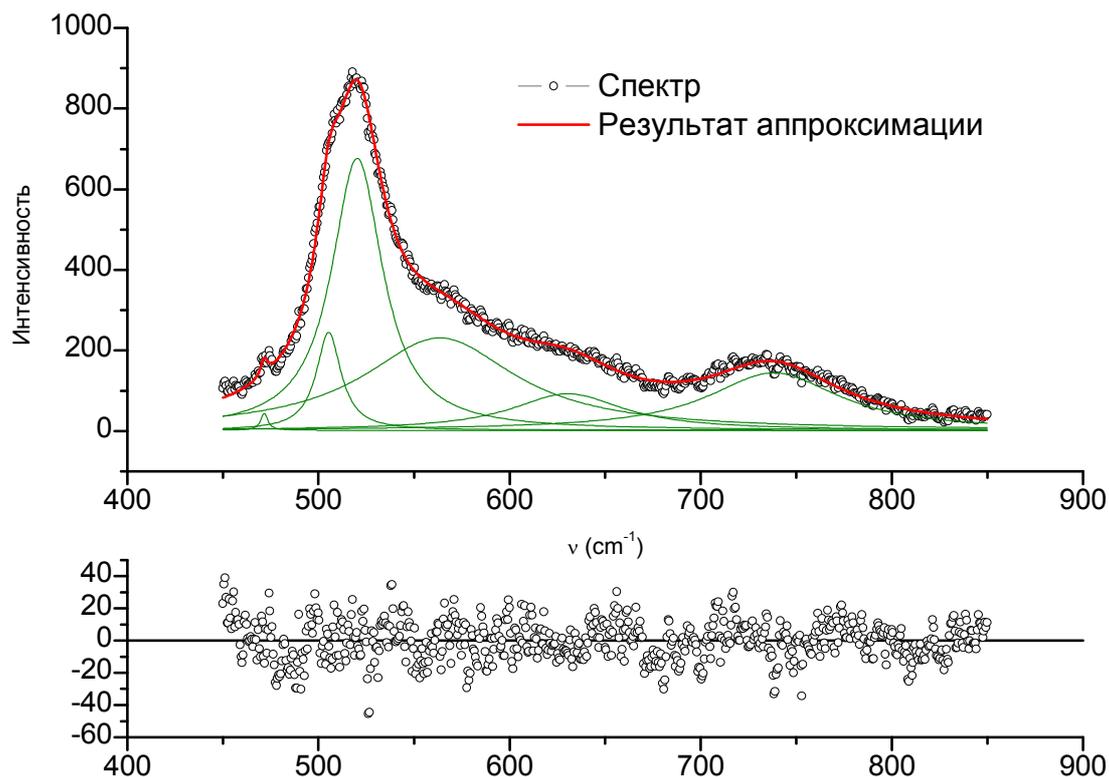


Рис. 9.13. Результат аппроксимации и отклонение экспериментальных данных от аппроксимирующей кривой

Если вам требуется аппроксимировать лишь определенный участок спектра, то это тоже можно сделать с помощью мастера аппроксимаций, указав лишь необходимый диапазон независимой переменной (см. выше). Заданный диапазон отобразится на графике в виде стрелок на концах отрезка после нажатия на кнопку **Select Range Graphically** (выбрать диапазон графически) (рис. 9.14).

Проделав описанные действия выше, вы аппроксимируете нужный участок спектра: аппроксимирующая линия появится лишь в указанном диапазоне.

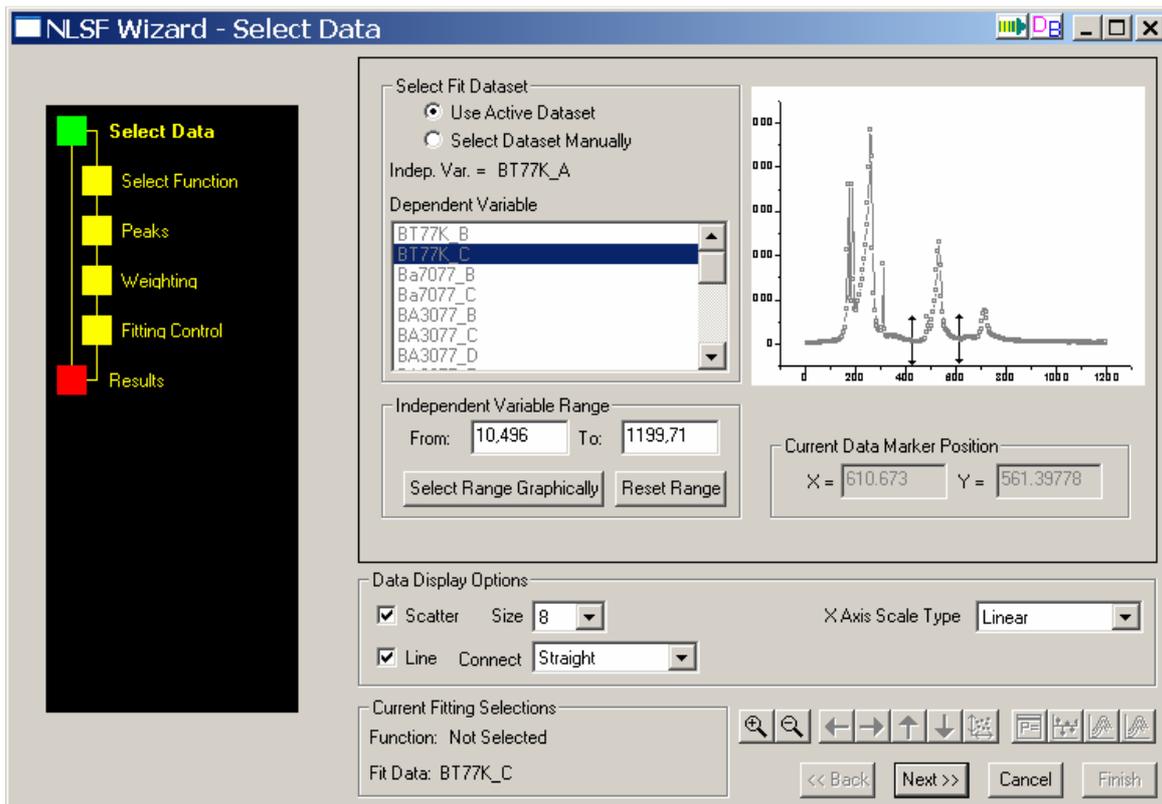


Рис. 9.14. Выбор необходимого участка графика

Чаще спектры аппроксимируются не лоренцианами, а функциями осцилляторов с затуханием. Спектр обычно аппроксимируется набором N аддитивных осцилляторов по формуле (9.1):

$$I(\omega, T) = (n(\omega, T) + 1) \left[\sum_{i=1}^N \frac{A_i \Gamma_{0i} \omega_{0i}^2 \omega}{(\omega_{0i}^2 - \omega^2)^2 + \Gamma_{0i}^2 \omega^2} \right], \quad (9.1)$$

где ω_{0i} – собственная частота, Γ_{0i} – затухание (damping), A_i – константа, пропорциональная силе i -го осциллятора, N – число предполагаемых пиков в спектре, а $n(\omega, T)$ – фактор температурной заселенности (6.2). Если спектр уже скорректирован на температуру, то берется только часть формулы в квадратных скобках.

Импортируйте файл BStat77K и отобразите спектр на графике.

Для того, чтобы ввести свою формулу для аппроксимации спектра, воспользуемся полученными ранее навыками. Отобразив на графике данные, в меню Analysis (анализ) выберите пункт Non-linear Curve Fit/ Advanced Fitting Tool (нелинейная аппроксимация/ расширенный инструмент для аппроксимации) (рис. 9.15).

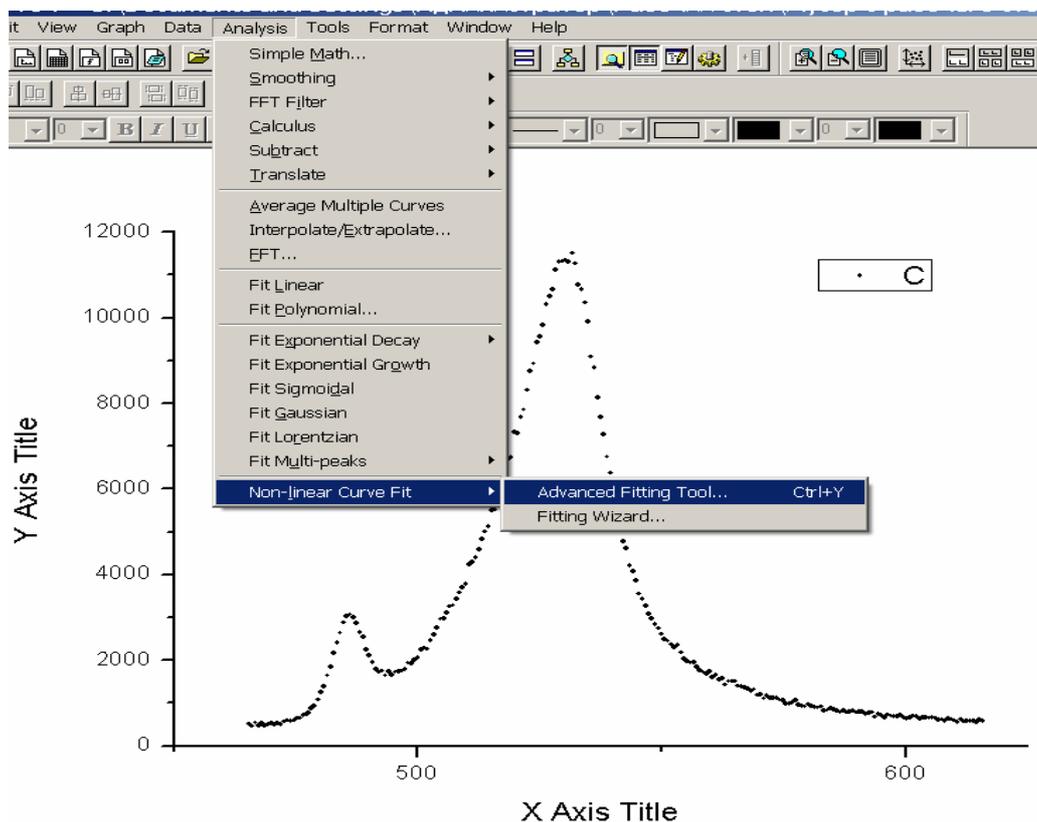


Рис. 9.15. Выбор режима аппроксимации

Появится окно **NonLinear Curve Fitting**, в котором вам нужно ввести новую функцию, нажав кнопку **New** (новый) (рис. 9.16).

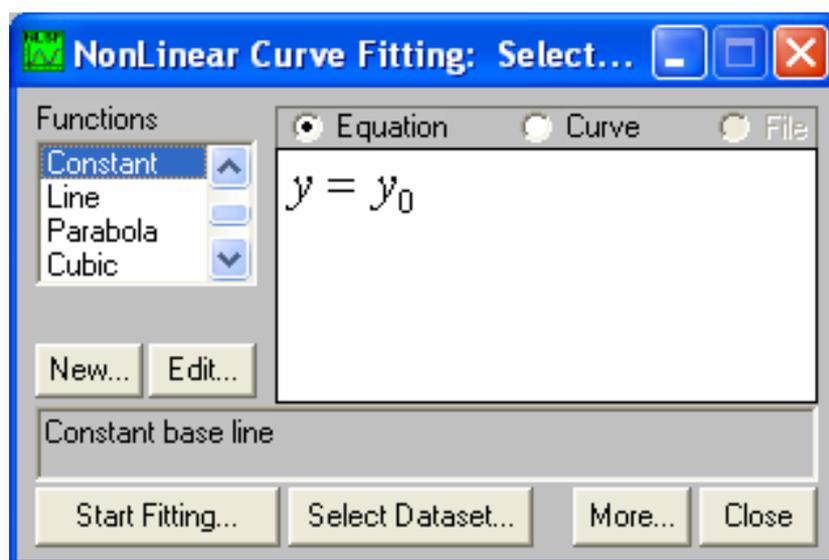


Рис. 9.16. Выбор аппроксимирующей функции

В сменившемся окне задайте имя новой функции, в списке **Number of Param.** укажите число параметров – 6, и в поле **Example** введите формулу (9.1) (рис. 9.17). Сохранив функцию нажатием кнопки **Save**, перейдите к выбору данных (**Select Dataset**), щелкнув кнопку **Accept** (принять).

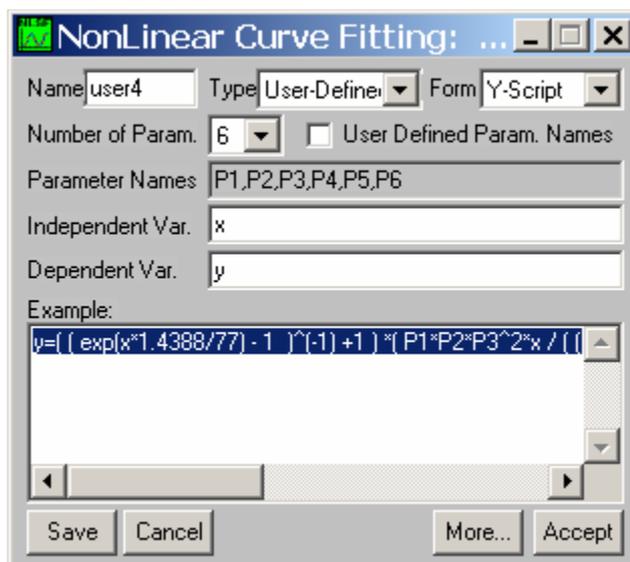


Рис. 9.17. Задание уравнения аппроксимирующей функции

$$y = ((\exp(x * 1.4388 / 77) - 1)^{-1} + 1) * (P1 * P2 * P3^2 * x / ((P3^2 - x^2)^2 + P2^2 * x^2) + P4 * P5 * P6^2 * x / ((P6^2 - x^2)^2 + P5^2 * x^2))$$

Выбрав нужный набор данных, в списке **Row** укажите диапазон, для которого будет проводиться аппроксимация (рис. 9.18).

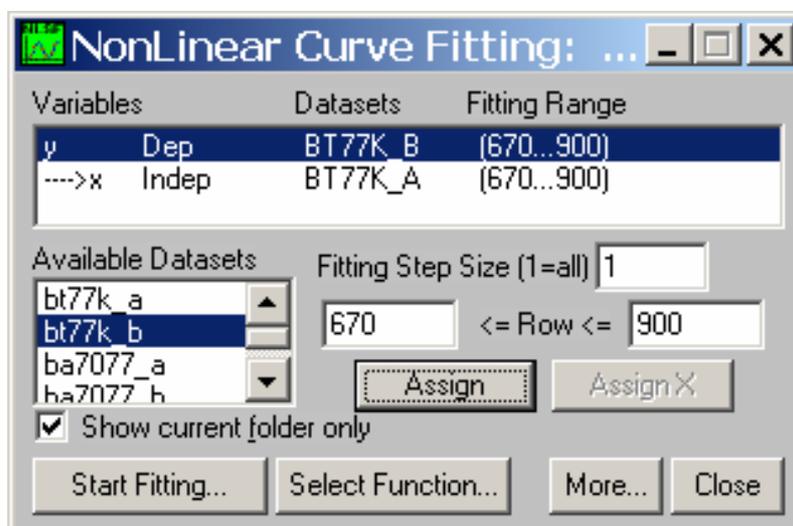


Рис. 9.18. Задание набора и диапазона аппроксимируемых данных

Нажмите кнопку **More** (больше), окно развернется и появится панель инструментов, на которой выберите меню **Options/ Constrains** (опции/ ограничения). В списке **Lower Bounds** (нижняя граница), устанавливая флажки для каждого параметра, задайте значение ограничения – нижняя граница > 0 для всех параметров (рис. 9.19). Если известны области возможных изменений некоторых параметров, то их можно задать в виде

двойных неравенств. Например, можно указать приблизительные области расположения пиков, задавая допустимую нижнюю границу (Lower Bounds) и допустимую верхнюю границу (Upper Bounds).

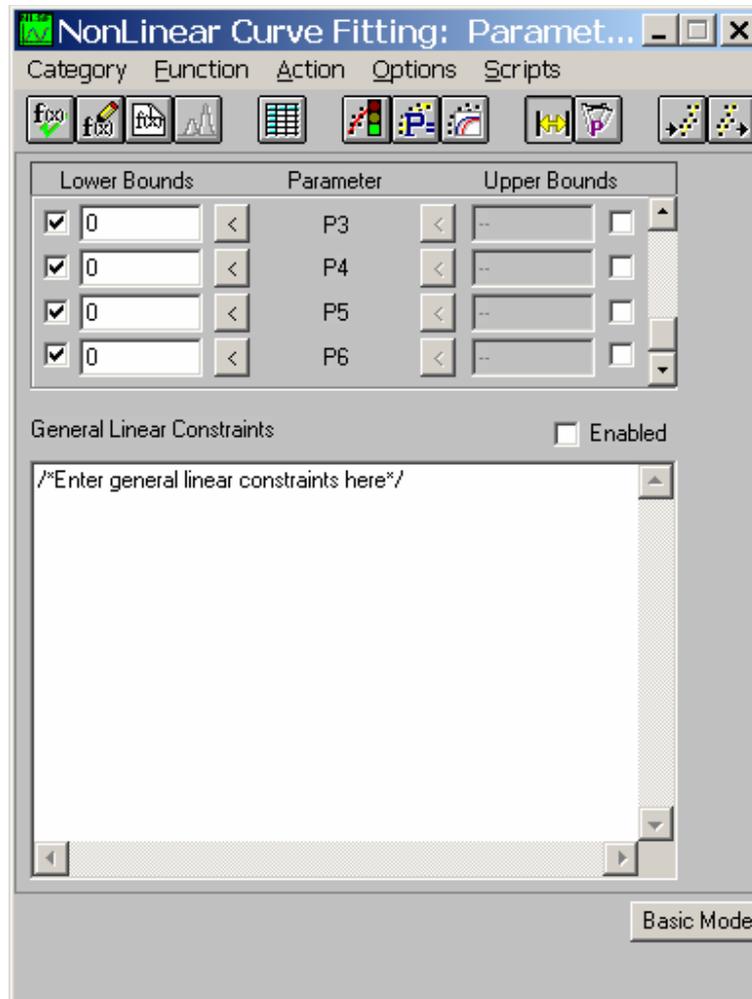


Рис. 9.19. Ввод ограничений на диапазон изменения параметров

Вернувшись к основному режиму (Basic Mode), можно приступить к аппроксимации (Start Fitting). У вас появится окно, в котором нужно задать начальные приближения для всех параметров (рис. 9.20). Если функция использовалась ранее, то в качестве начальных приближений будут использоваться старые значения параметров.

От того, насколько хорошо выбрано начальное приближение, зависит сходимость и результат аппроксимации. Возможно, что начальное приближение окажется неудачным, тогда значения параметров придется подредактировать, чтобы аппроксимирующая линия наилучшим образом «легла» на участок спектра. Если используется функция с большим числом параметров, иногда бывает полезно часть параметров зафиксировать, убрав галочки в колонке Vary (варьировать). В нашем случае удачным начальным приближением является: $P1=1$, $P2=10$, $P3=490$, $P4=10$, $P5=25$, $P6=530$.

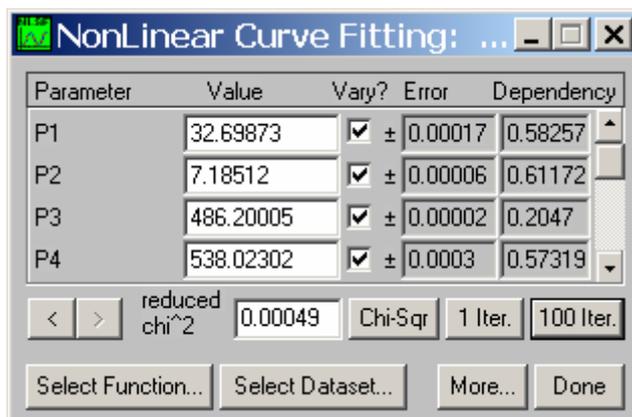


Рис. 9.20. Значения параметров аппроксимации

После проведения аппроксимации на графике появится аппроксимирующая кривая на том участке спектра, который вы указали ранее. Также отобразится легенда со всеми значениями параметров, но ее можно удалить, так как все параметры имеются в протоколе результатов (рис. 9.21).

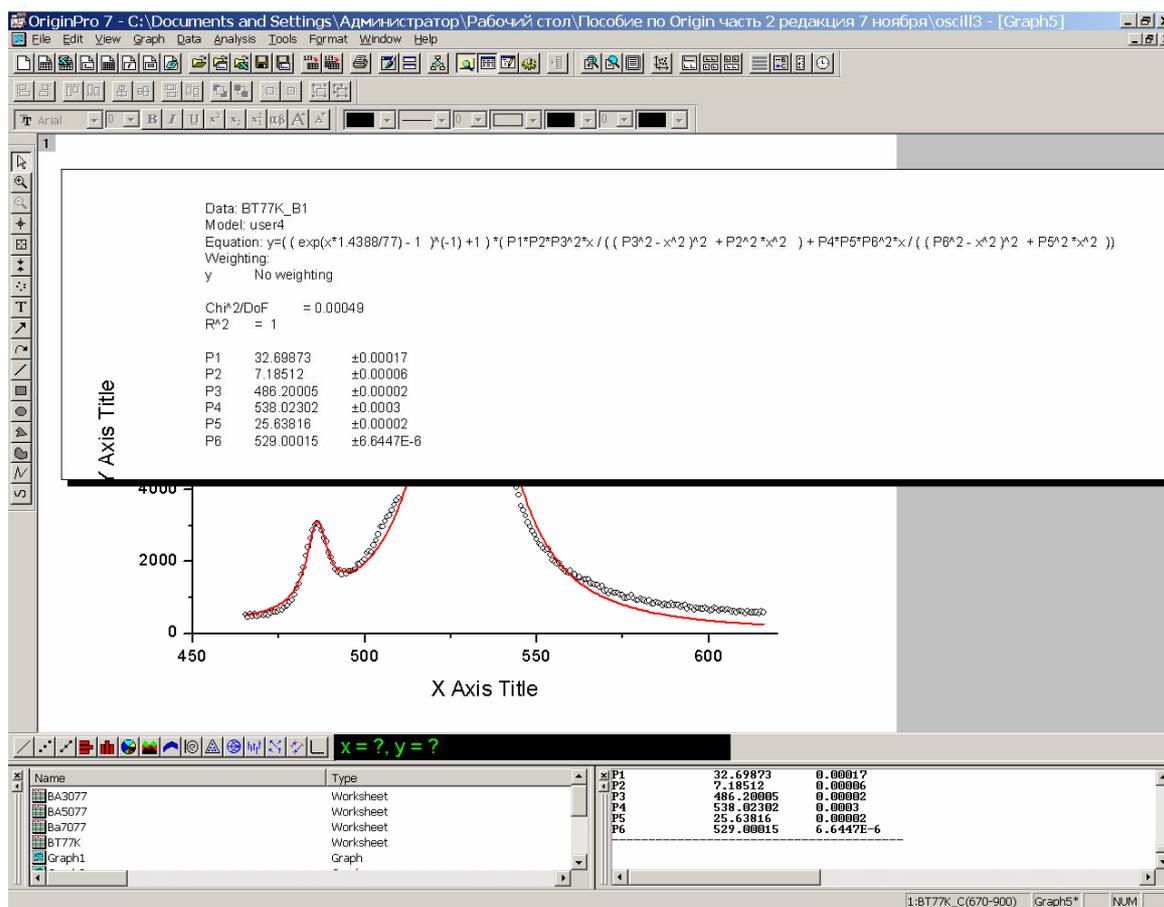


Рис. 9.21. Результат аппроксимации

Data: BT77K_B1

Model: user4

Equation: $y = ((\exp(x \cdot 1.4388/77) - 1)^{-1} + 1) \cdot (P1 \cdot P2 \cdot P3^2 \cdot x / ((P3^2 - x^2)^2 + P2^2 \cdot x^2) + P4 \cdot P5 \cdot P6^2 \cdot x / ((P6^2 - x^2)^2 + P5^2 \cdot x^2))$

Weighting:

y No weighting

Chi²/DoF R²

0.00049 1

Parameter	Value	Error
P1	32.69873	0.00017
P2	7.18512	0.00006
P3	486.20005	0.00002
P4	538.02302	0.0003
P5	25.63816	0.00002
P6	529.00015	6.6447E-6

В свойствах координатных осей на оси X укажите лишь значения диапазона, на котором проводилась аппроксимация, и в результате получится следующий график (рис. 9.22).

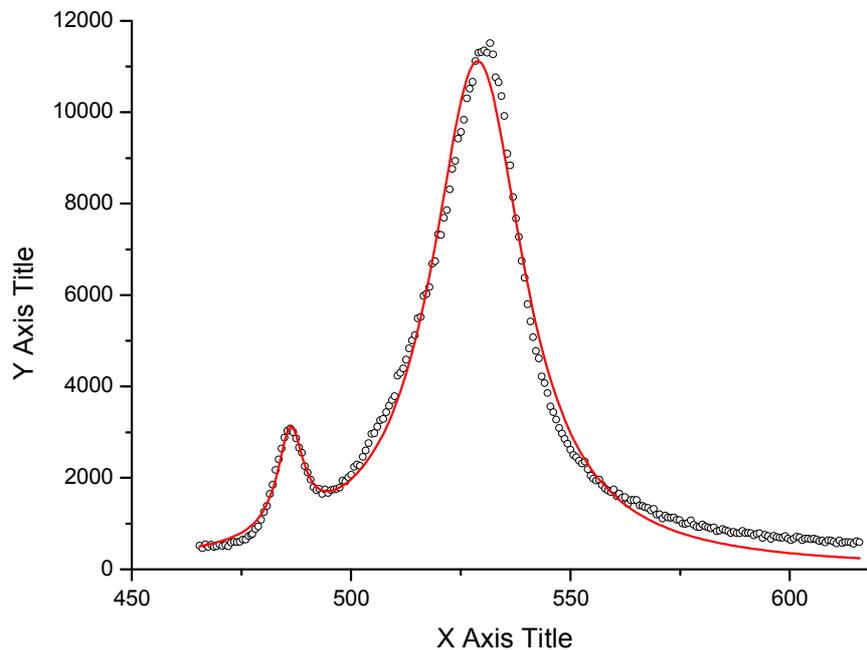


Рис. 9.22 Результат аппроксимации участка спектра функцией (9.1)

Упражнение. Попробуйте улучшить результаты аппроксимации, используя большее число осцилляторов ($N = 3$ и 4 в формуле (9.1)). В качестве ориентира см. рис. 9.23 и 9.24.

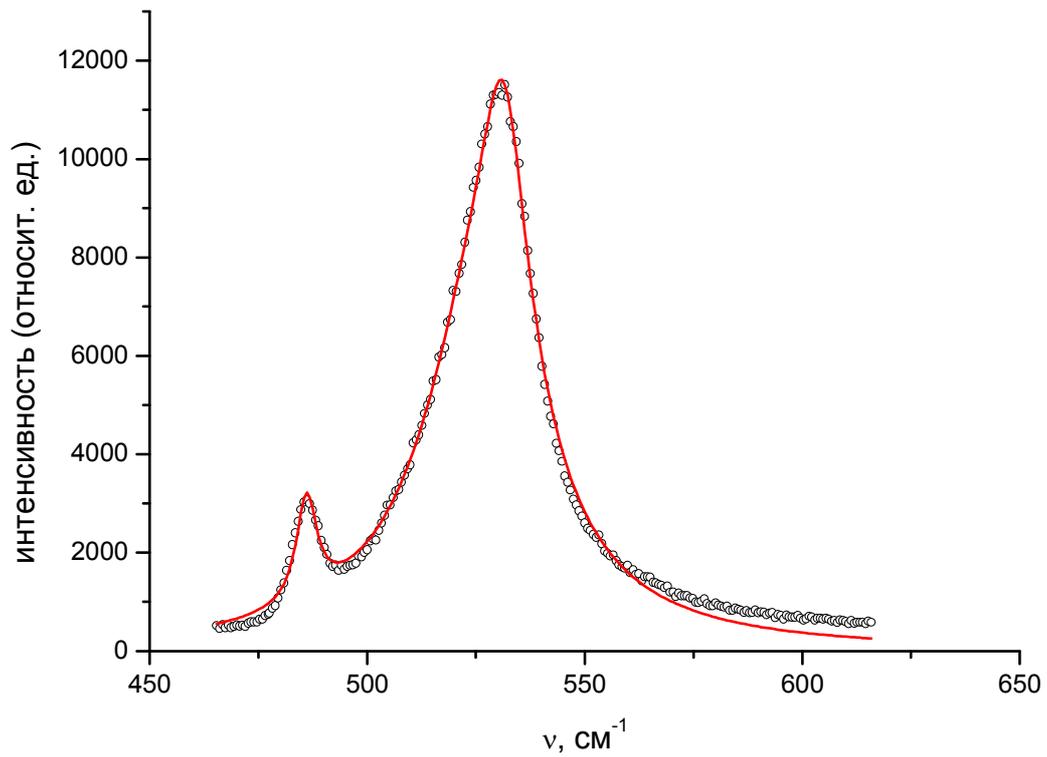


Рис. 9.23 Результат аппроксимации участка спектра функцией (9.1) с $N=3$

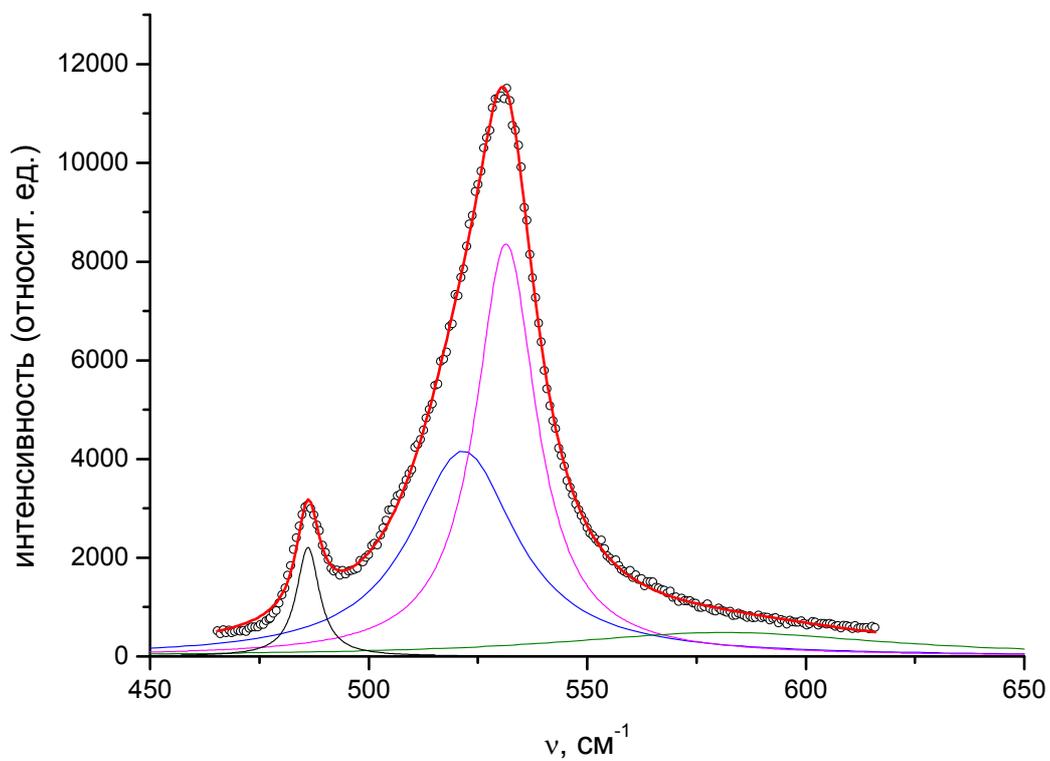


Рис. 9.24 Результат аппроксимации участка спектра функцией (9.1) с $N=4$

Литература

1. Исакова О.П., Тарасевич Ю.Ю. Обработка и визуализация данных физических экспериментов с помощью пакета Origin. Учебно-методическое пособие. – Астрахань, Издательство ОГОУ ДПО «АИПКП», 2007. – 68 с.
2. Богданов А.А. Визуализация данных в Microcal Origin. – М.: «Альтекс-А», 2003. – 112 с. ISBN: 5-94271-010-4.
3. Поликарпов В.М., Ушаков И.В., Головин Ю.М. Современные методы компьютерной обработки экспериментальных данных: Учебное пособие. – Тамбов: Издательство ТГТУ, 2006. – 84 с. ISBN 5-8265-0498-6.
4. Компьютер для химика. Учебно-методическое пособие. Составитель В.Е. Шаронов. – Новосибирск, Новосибирский государственный университет, 2006. – 44 с.
5. Миронов В.Л., Суранов А.Я. Обработка случайных сигналов/ Учебное пособие. – Барнаул, Изд-во АГУ, 2001. – 92 с.
6. Yuzyuk Yu. I., Frahi R., Lorman V.L. et al J. Appl. Phys. 84, 452 (1998).
7. Burns G. and Scott B.A. Phys. Rev. B 7, 3088 (1973).

